

# *Effektive Wechselwirkungen für Quantenflüssigkeiten und Quantengase*

*Kernmaterie, flüssiges Helium und  
ultrakalte atomare Fermigase*

---

Vom Fachbereich Physik der  
Technischen Universität Darmstadt

zur Erlangung des Grades eines  
Doktors der Naturwissenschaften  
(Dr. rer. nat.)

genehmigte Dissertation von

*Dipl.-Phys. Robert Roth*  
aus Ludwigshafen am Rhein

Darmstadt 2000  
D 17

Referent: Prof. Dr. W. Nörenberg

Korreferent: Prof. Dr. J. Wambach

Tag der Einreichung: 11. Juli 2000

Tag der Prüfung: 25. Oktober 2000

„Der Gebildete treibt die Genauigkeit nicht weiter, als es der Natur der Sache entspricht.“

*...Effektive Modelle*

„Das Ganze ist mehr als die Summe seiner Teile.“

*...Korrelationen*

Aristoteles (384-322 v. Chr.)



# Inhaltsverzeichnis

Einleitung . . . . .	ix
Zusammenfassung und Ausblick . . . . .	xiii
 <i>I Die Methode der unitären Korrelatoren in Anwendung auf stark wechselwirkende Quantenflüssigkeiten</i>	
Einleitung zu Teil I . . . . .	3
<i>1 Die Methode der unitären Korrelatoren</i> . . . . .	<i>5</i>
1.1 Konzept . . . . .	5
1.2 Korrelator im Zweiteilchenraum . . . . .	6
1.2.1 Unitärer Korrelationsoperator . . . . .	7
1.2.2 Korrelierte Wellenfunktion . . . . .	8
1.2.3 Korrelierte Operatoren . . . . .	9
1.3 Korrelator im Vielteilchenraum . . . . .	12
1.3.1 Unitärer Korrelationsoperator . . . . .	12
1.3.2 Clusterzerlegungsprinzip und Clusterentwicklung . . . . .	13
1.3.3 Hamiltonoperator in Zweiteilchennäherung . . . . .	14
1.3.4 Jenseits der Zweiteilchennäherung . . . . .	15
1.3.5 Produktnäherung des Vielteilchenkorrelators . . . . .	16
1.4 Vielteilchenkorrelationen als Koordinatentransformation . . . . .	17
1.4.1 Normerhaltende Koordinatentransformation . . . . .	17
1.4.2 Korrelierte Operatoren . . . . .	19
1.4.3 Eine mögliche Dreiteilchentransformation . . . . .	21
1.4.4 Koordinatentransformation vs. Produktnäherung . . . . .	23
<i>2 Stark wechselwirkende Fermigase</i> . . . . .	<i>25</i>
2.1 Zustandsgleichung . . . . .	25
2.1.1 Hamiltonoperator und Zustände . . . . .	25
2.1.2 Energie in Zweiteilchennäherung . . . . .	28
2.1.3 Dreiteilchenbeiträge zur Energie . . . . .	31
2.1.4 Dichteabhängige Korrelatoren in Zweiteilchennäherung . . . . .	33
2.1.5 Dreiteilchen-Kontaktwechselwirkung . . . . .	36
2.2 Orts- und Impulsraumdichten . . . . .	37
2.2.1 Einteilchendichtematrix . . . . .	37
2.2.2 Zweiteilchendichtematrix . . . . .	39
2.2.3 Korrelierte Zweiteilchendichtematrix . . . . .	41
2.2.4 Korrelierte Einteilchendichtematrix . . . . .	43
<i>3 Zwei Modelluntersuchungen: Die Homework-Probleme</i> . . . . .	<i>46</i>
3.1 Homework-1: Zustandsgleichung in Zweiteilchennäherung . . . . .	46

3.1.1	Zweiteilchenoptimaler Korrelator . . . . .	47
3.1.2	Materieenergie mit zweiteilchenoptimalen Korrelatoren . . . . .	48
3.1.3	Energiebeiträge im Detail . . . . .	50
3.1.4	Materieoptimaler Korrelator . . . . .	53
3.2	Homework-1: Jenseits der Zweiteilchennäherung . . . . .	56
3.2.1	Dreiteilchenbeiträge . . . . .	56
3.2.2	Dichteabhängige Korrelatoren . . . . .	61
3.2.3	Dreiteilchen-Kontaktwechselwirkung . . . . .	64
3.3	Homework-1: Dichten und Besetzungszahlen . . . . .	66
3.3.1	Korrelierte Zweiteilchendichte . . . . .	66
3.3.2	Korrelierte Einteilchendichte und Besetzungszahlen . . . . .	68
3.4	Homework-2: Zustandsgleichung . . . . .	73
3.4.1	Zustandsgleichung in Zweiteilchennäherung . . . . .	74
3.4.2	Dreiteilchenbeiträge zur Zustandsgleichung . . . . .	76
3.4.3	Vergleich mit Ergebnissen der Jastrow-Methode . . . . .	77
4	<i>Kernmaterie mit phänomenologischen Potentialen</i> . . . . .	80
4.1	Gammel-Christian-Thaler-Potential . . . . .	80
4.1.1	Globaler Korrelator . . . . .	82
4.1.2	Spin-Isospinabhängiger Korrelator . . . . .	85
4.1.3	Vergleich . . . . .	86
4.2	Gammel-Thaler-5200-Potential . . . . .	89
4.2.1	Optimale Korrelationsfunktionen . . . . .	89
4.2.2	Vergleich mit Jastrow-Rechnungen . . . . .	91
5	<i>Bosonische Materie: <math>^4\text{He}</math>-Flüssigkeit</i> . . . . .	93
5.1	Motivation . . . . .	93
5.2	Stark wechselwirkendes Bosegas . . . . .	95
5.2.1	Versuchszustand . . . . .	95
5.2.2	Erwartungswerte und Zustandsgleichung . . . . .	96
5.2.3	Effektive Korrekturen zur Zweiteilchennäherung . . . . .	97
5.3	Flüssiges $^4\text{He}$ und Lennard-Jones-Potential . . . . .	99
5.3.1	Optimaler Korrelator I . . . . .	99
5.3.2	Optimaler Korrelator II . . . . .	101
5.3.3	Zustandsgleichung in Zwei- und Dreiteilchennäherung . . . . .	103
5.3.4	Zustandsgleichung mit dichteabhängigem Korrelator . . . . .	105
6	<i>Endliche Systeme: <math>^4\text{He}</math>-Tröpfchen</i> . . . . .	107
6.1	Ein einfaches Variationsmodell . . . . .	107
6.1.1	Versuchszustand . . . . .	107
6.1.2	Optimaler Korrelator . . . . .	108
6.1.3	Korrelierter Hamiltonoperator in Zweiteilchennäherung . . . . .	109
6.1.4	Dreiteilchenbeitrag zum korrelierten Hamiltonoperator . . . . .	113
6.2	$^4\text{He}$ -Tröpfchen mit Lennard-Jones-Potential . . . . .	114
6.2.1	Energieminimierung in Zweiteilchennäherung . . . . .	114
6.2.2	Energieminimierung in Dreiteilchennäherung . . . . .	117
6.2.3	Energieminimierung mit dichteabhängigem Korrelator . . . . .	120

## II Effektive Kontaktwechselwirkungen für verdünnte atomare Fermigase in externen Potentialen

Einleitung zu Teil II . . . . .	127
7 Effektive Kontaktwechselwirkungen für verdünnte Quantengase . . . . .	130
7.1 Konzeption . . . . .	130
7.2 Ableitung der effektiven Kontaktwechselwirkung . . . . .	132
7.2.1 Darstellung der Energieverschiebung . . . . .	133
7.2.2 Parametrisierung der Kontaktwechselwirkung . . . . .	136
7.2.3 Annahmen und Gültigkeit . . . . .	138
7.2.4 Ein anderer Zugang: Pseudopotential . . . . .	139
7.3 Ein illustratives Beispiel . . . . .	140
7.3.1 Kastenpotential mit Randbedingung . . . . .	141
7.3.2 Energiespektrum und Energieverschiebung . . . . .	141
7.3.3 Wellenfunktionen . . . . .	143
7.3.4 Energieverschiebung mit Kontaktwechselwirkung . . . . .	145
7.3.5 Qualität der Kontaktwechselwirkung . . . . .	148
8 Thomas-Fermi-Näherung mit effektiver Kontaktwechselwirkung . . . . .	151
8.1 Präliminar: Dichtefunktionaltheorie . . . . .	151
8.1.1 Energiefunktional und Hohenberg-Kohn-Theorem . . . . .	151
8.1.2 Semiklassische Beschreibung und Thomas-Fermi-Näherung . . . . .	152
8.2 Energiedichte des homogenen Fermigases . . . . .	154
8.2.1 Hamiltonoperator und Zustände . . . . .	154
8.2.2 Energiedichte . . . . .	155
8.3 Grundzustand des inhomogenen Fermigases . . . . .	158
8.3.1 Energiedichtefunktional in Thomas-Fermi-Näherung . . . . .	158
8.3.2 Extremalbedingung und Grundzustandsdichte . . . . .	159
8.3.3 Deformierte Fallenpotentiale . . . . .	161
8.3.4 Erweiterte Thomas-Fermi-Näherung . . . . .	162
9 Ultrakalte verdünnte Fermigase in externen Potentialen . . . . .	164
9.1 Einkomponentige Fermigase: Grundlagen . . . . .	164
9.1.1 Thomas-Fermi-Energiedichte . . . . .	164
9.1.2 Effekt der p-Wellenwechselwirkung . . . . .	166
9.2 Einkomponentige Fermigase: Stabilität . . . . .	168
9.2.1 Illustration im Rahmen eines Variationsmodells . . . . .	169
9.2.2 Stabilitätsbedingungen . . . . .	170
9.3 Zweikomponentige Fermigase: Grundlagen . . . . .	173
9.3.1 Thomas-Fermi-Energiedichtefunktional . . . . .	173
9.3.2 Einfluß der Wechselwirkung . . . . .	175
9.4 Zweikomponentige Fermigase: Stabilität . . . . .	177
9.4.1 Die Fälle $a_0 \leq 0, a_1 \leq 0$ und $a_0 > 0, a_1 < 0$ . . . . .	177
9.4.2 Der Fall $a_0 < 0, a_1 > 0$ . . . . .	182
9.4.3 Struktur und Stabilität der Hochdichtephase . . . . .	186
9.4.4 Experimentelle Relevanz . . . . .	189

9.5	Zweikomponentige Fermigase: Komponentenseparation . . . . .	190
9.5.1	Energiedichte und Komponentenseparation . . . . .	190
9.5.2	Ein Variationsmodell . . . . .	191
9.5.3	Systematik der Komponentenseparation . . . . .	193
9.5.4	Separationsbedingungen . . . . .	195
9.5.5	Separation versus Kollaps . . . . .	197
<i>A</i>	<i>Ergänzungen zu Teil I</i> . . . . .	199
A.1	Fermigas . . . . .	199
A.1.1	Integrale über die Fermikugel . . . . .	199
A.1.2	Erwartungswerte im Fermigas . . . . .	200
<i>B</i>	<i>Ergänzungen zu Teil II</i> . . . . .	204
B.1	Pseudopotential nach Huang und Yang . . . . .	204
B.1.1	Ableitung des Pseudopotentials . . . . .	204
B.1.2	Diskussion des Pseudopotentials . . . . .	207
B.1.3	Erweiterung des Pseudopotentials . . . . .	208
B.2	Freies Fermigas im harmonischen Oszillator . . . . .	209
B.2.1	Exakte Lösung . . . . .	210
B.2.2	Thomas-Fermi-Näherung . . . . .	211
B.2.3	Qualität der Thomas-Fermi-Näherung . . . . .	212
<i>C</i>	<i>MATHEMATICA-Notebooks</i> . . . . .	216
C.1	Neutronenmaterie mit Homework-1-Potential . . . . .	216
C.2	$^4\text{He}$ -Flüssigkeit und Tröpfchen . . . . .	218
	Notation . . . . .	220
	Literaturverzeichnis . . . . .	221



# Einleitung

Auf vielen Gebieten der Physik sieht man sich mit der Aufgabe konfrontiert, die statischen und dynamischen Eigenschaften eines Vielteilchensystems im Rahmen der Quantentheorie zu beschreiben. Einige Beispiele sind der Atomkern mit bis zu 200 Teilchen, atomare Cluster mit bis zu 1000 Teilchen, atomare Gase in externen Feldern bestehend aus einigen Millionen Teilchen bis hin zu homogener Kernmaterie oder Heliumflüssigkeiten.

Bei der Lösung des quantenmechanischen Vielteilchenproblems ist man von vornherein auf eine Reihe von Näherungen angewiesen. Ein möglicher Ausgangspunkt ist die Annahme eines nicht-relativistischen Systems inerter Teilchen, die mittels eines Zwei- oder Mehrteilchenpotentials wechselwirken.

Mit Ausnahme der Coulombwechselwirkung handelt es sich bei den relevanten nicht-relativistischen Wechselwirkungen nicht um elementare Kräfte, sondern um eine effektive Beschreibung der Dynamik fundamentalerer Freiheitsgrade. So sind z.B. Nukleonen keine elementaren Teilchen ohne intrinsische Struktur, sondern aus Quarks und Gluonen zusammengesetzte Objekte. Die Wechselwirkung zwischen zwei Nukleonen ist von der komplexen Dynamik dieser Quarks und Gluonen — beschrieben durch die Quantenchromodynamik (QCD) — bestimmt. Ähnlich wird im Falle eines atomaren Vielteilchensystems die Wechselwirkung zwischen zwei neutralen Atomen von der Coulombwechselwirkung der Elektronen und Kerne beider Atome und den daraus resultierenden Polarisierungseffekten bestimmt. Die Behandlung des Vielteilchenproblems auf Basis dieser Freiheitsgrade ist aussichtslos. Daher geht man zu einem effektiven Modell über, in dem die Konstituenten des Vielteilchensystems als inerte Teilchen behandelt werden, die vermittels eines effektiven Zwei- oder Mehrteilchenpotentials wechselwirken.

Das Potential kann entweder phänomenologisch oder anhand eines an den fundamentalen Freiheitsgraden orientierten Modells konstruiert werden. Im Fall der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung hat sich die sog. Mesonenaustauschtheorie als hilfreich erweisen. Sie basiert auf den Konzepten der QCD und beschreibt die Wechselwirkung durch den Austausch massiver Mesonen zwischen den Nukleonen. Aus ihr kann zwar keine parameterfreie Form der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung konstruiert werden, aber sie liefert die Operatorstruktur und die Radialabhängigkeiten bei großen Teilchenabständen. Bei kleinen Abständen kommen wiederum QCD-Freiheitsgrade zum tragen, die nicht in dem effektiven Modell des Mesonenaustausch enthalten sind. Die freien Parameter und das kurzreichweitige Verhalten der Wechselwirkung müssen durch Anpassung an experimentelle Daten, wie Streuphasen und Eigenschaften des Deuterons, bestimmt werden.

Ein charakteristisches Merkmal vieler mikroskopischer Wechselwirkungen ist das Auftreten einer starken Abstoßung für kleine Teilchenabstände, die sich durch ein rapides Anwachsen des Potentials — den sogenannten *Core* — manifestiert. Die kurzreichweitige Abstoßung bewirkt, daß die Wahrscheinlichkeit, zwei Teilchen eines Vielteilchensystems in einem Abstand kleiner dem Radius des Cores vorzufinden, verschwindend

gering ist. Der Core verursacht starke *kurzreichweitige Korrelationen* im Vielteilchensystem.

Diese Korrelationen stellen eines der Hauptprobleme bei der näherungsweisen Lösung des Vielteilchenproblems auf Basis eines realistischen Potentials dar. Die verschiedenen Näherungsverfahren beruhen im allgemeinen auf der Lösung des Vielteilchenproblems in einem eingeschränkten Modellraum, der nur einen sehr kleinen Teil des vollen Vielteilchen-Hilbertraumes abdeckt. Oft wird dieser Modellraum von symmetrisierten oder antisymmetrisierten Produktzuständen oder einer Superposition einer endlichen (numerisch handhabbaren) Zahl dieser Produktzustände gebildet. Ein Beispiel ist das Hartree-Fock-Modell, das den Vielteilchenzustand durch ein antisymmetrisiertes Produkt aus selbstkonsistent bestimmten Einteilchenzuständen beschreibt. In derartigen Modellräumen sind die kurzreichweitigen, vom Core der Wechselwirkung induzierten Korrelationen nicht enthalten. Daher sind die Matrixelemente der Wechselwirkung, berechnet mit Zuständen aus dem Modellraum, unphysikalisch groß oder gar divergent.

Diesem Problem kann auf zwei Wegen begegnet werden: Zum einen kann der Modellraum so verändert werden, daß kurzreichweitige Korrelationen enthalten sind. Zum anderen kann die volle Wechselwirkung durch eine effektive, dem Modellraum angepaßte Wechselwirkung ersetzt werden. Es existieren eine Reihe etablierter Methoden, die einen der beiden Wege realisieren. Die Anpassung des Modellraums kann z.B. mit der Methode der Jastrow-Korrelationsfunktionen [Clar79, Jast55] erfolgen. Hierbei werden dem Vielteilchenzustand kurzreichweitige Korrelationen durch Multiplikation mit einem Produkt aus abstandsabhängigen Korrelationsfunktionen für jedes Teilchenpaar aufgeprägt. Auf Seiten der effektiven Wechselwirkungen ist insbesondere die Bruecknersche G-Matrix [Day67] zu nennen. Es hängt von den Eigenschaften des untersuchten Systems ab, ob und welche der verschiedenen Methoden zur Behandlung der Korrelationen geeignet ist.

Diese Arbeit beschäftigt sich mit zwei verschiedenen Klassen von Vielteilchensystemen. Im ersten Teil werden stark wechselwirkende Systeme hoher Dichte, z.B. Kern- und Neutronenmaterie bzw.  $^4\text{He}$ -Flüssigkeiten, behandelt. Der mittlere Teilchenabstand liegt in diesen Systemen nur wenig über dem Radius der Cores der Zweiteilchenwechselwirkung: Für Kernmaterie beträgt das Verhältnis von mittlerem Teilchenabstand zum Coreradius etwa 3, im Falle der  $^4\text{He}$ -Flüssigkeit sogar nur 1.4. Damit spielen kurzreichweitige Korrelationen in diesen Systemen eine dominante Rolle.

Zur Behandlung der starken kurzreichweitigen Korrelationen wird die Methode der unitären Korrelatoren [UCOM98, Roth97, Rist67] aufgegriffen und erweitert. Sie basiert auf einer unitären Transformation bezüglich der Relativkoordinate zweier Teilchen, die durch einen unitären Korrelationsoperator beschrieben wird. Durch Anwendung des Korrelationsoperators auf einen Zustand des Modellraumes, z.B. einen Produktzustand, ergibt sich ein korrelierter Zustand, der dem Core der Wechselwirkung angepaßt ist. Umgekehrt liefert die Transformation des Hamiltonoperators eine „gezähmte“ effektive Wechselwirkung, die den Modellraumzuständen angepaßt ist. Die kurzreichweitige Abstoßung ist dadurch praktisch vollkommen eliminiert; an ihre Stelle tritt eine Impulsabhängigkeit mit tensorieller effektiver Masse, so daß die effektive Wechselwirkung streuphasenäquivalent zum ursprünglichen Potential ist. Für die Berechnung physikalischer Observablen sind beide Wege — korrelierte Zustände bzw. effektive Wechselwirkung — vollkommen äquivalent. Im Rahmen der sog. Zweiteilchennäherung, die einem Bild unabhängiger Teilchenpaare entspricht, kann der Operator der effektiven Wechselwirkung in geschlossener Form angegeben werden. Das erlaubt, im Gegensatz zu vielen

anderen effektiven Wechselwirkungen (z.B. der Bruecknerschen-G-Matrix), effiziente Rechnungen zur Struktur und Dynamik des Vielteilchensystems auf Basis realistischer Wechselwirkungen.

Im zweiten Teil der Arbeit werden verdünnte, schwach wechselwirkende Systeme, insbesondere ultrakalte Gase fermionischer Atome in externen Potentialen, betrachtet. Im Gegensatz zu den im ersten Teil behandelten Systemen hoher Dichte wirken die kurzreichweitigen Korrelationen auf Skalen, die sehr viel kleiner als die Wellenlänge der Relativbewegung sind. Der mittlere Teilchenabstand ist 100 bis 1000 mal größer als die Reichweite der Wechselwirkung. Zusammen mit den niedrigen Relativimpulsen hat das zur Folge, daß die detaillierte Radialabhängigkeit des Potentials nicht aufgelöst wird, die Wechselwirkung geht nur in integrelem Sinne ein. Damit bietet sich die Ersetzung des vollen Potentials durch eine effektive Kontaktwechselwirkung [RoFe00b] an, die im Zweiteilchen-Modellraum das gleiche Energiespektrum zeigt, wie das ursprüngliche Potential im vollen Hilbertraum. Die effektive Kontaktwechselwirkung enthält somit implizit alle Korrelationseffekte auf Zweiteilchenniveau und ist gleichzeitig optimal auf die Verwendung mit Produktzuständen angepaßt, da alle relevanten Matrixelemente analytisch berechnet werden können.

An dieser Stelle sei auf die Einleitungen zu den beiden Teilen dieser Arbeit auf den Seiten 3 bzw. 127 verwiesen. Sie diskutieren die Eigenschaften der betrachteten Systeme und die verwendeten Methoden im Detail.



# Zusammenfassung und Ausblick

Diese Arbeit befaßt sich mit zwei verschiedenen Klassen quantenmechanischer Vielteilchensysteme: zum einen stark wechselwirkende Systeme hoher Dichte, z.B. Kernmaterie und homogene  ${}^4\text{He}$ -Flüssigkeiten bzw. endliche Kerne und kleine  ${}^4\text{He}$ -Tröpfchen, zum anderen verdünnte Systeme, z.B. atomare Gase in externen Potentialen. Der Schwerpunkt liegt auf der Entwicklung von Methoden zur Konstruktion einer dem Problem angepaßten effektiven Wechselwirkung auf Basis realistischer Zweiteilchenpotentiale und deren Anwendung zur Beschreibung der relevanten physikalischen Observablen in den jeweiligen Systemen.

TEIL I · Der erste Teil dieser Arbeit ist der *Methode der unitären Korrelatoren* gewidmet, deren Grundlagen bereits in vorangehenden Veröffentlichungen [UCOM98, Roth97, Schn96] dargestellt wurden. Diese Methode zur Behandlung der Korrelationen im Vielteilchensystem basiert auf einem unitären Korrelationsoperator  $\mathbf{C}$ , der die Wirkung der kurzreichweitigen Abstoßung des Potentials durch eine abstandsabhängige radiale Verschiebung in der Relativkoordinate des Zweiteilchensystems simuliert. Die Anwendung des Korrelationsoperators auf einen Vielteilchenzustand — z.B. einen symmetrisierten oder antisymmetrisierten Produktzustand — liefert einen *korrelierten Zustand*, der die kurzreichweitigen Korrelationen enthält. Alternativ kann der Hamiltonoperator mit Hilfe des Korrelationsoperators unitär transformiert werden, woraus eine „gezähmte“ korrelierte Wechselwirkung resultiert. Die unitäre Transformation entfernt den Core der ursprünglichen Wechselwirkung und erzeugt eine Impulsabhängigkeit mit tensorieller effektiver Masse, derart daß die effektive Wechselwirkung per Constructionem streuphasenäquivalent zum ursprünglichen Potential ist. Analog können die Effekte der kurzreichweitigen Korrelationen auf beliebige andere Observablen, z.B. rms-Radien und Dichten, durch unitäre Transformation des entsprechenden Operators mit dem Korrelationsoperator beschreiben werden. Die praktische Anwendung im Vielteilchensystem erfordert die Zerlegung der korrelierten Operatoren nach irreduziblen Teilchenzahlen im Sinne der sog. Clusterentwicklung. Für Systeme moderater Dichte kann diese Entwicklung nach der Zweiteilchenordnung abgebrochen werden, d.h. man geht von einem Bild unabhängiger Teilchenpaare aus. Bei höheren Dichten ist diese Zweiteilchennäherung nur noch bedingt geeignet und Dreiteilchen- und höhere Ordnungen gewinnen an Bedeutung. Im ersten Kapitel dieser Arbeit werden daher, neben den formalen Grundlagen, Konzepte zur Behandlung von Drei- und Mehrteilchenkorrelationen im Rahmen der Methode der unitären Korrelatoren entwickelt.

Im zweiten Kapitel wird der formale Apparat auf dichte, stark wechselwirkende Fermigase, insbesondere Kern- und Neutronenmaterie, angewendet. Es werden geschlossene Ausdrücke für die Zustandsgleichung — korrelierte Energie pro Teilchen als Funktion der Dichte — und korrelierte Ein- und Zweiteilchendichten in Mean-Field-Näherung abgeleitet. Neben der expliziten Berechnung in Zwei- und Dreiteilchennäherung werden effektive Beschreibungen der Korrelationseffekte jenseits der Zweiteilchenordnung durch

dichteabhängige Korrelatoren bzw. effektive Dreiteilchen-Kontaktwechselwirkungen diskutiert.

Darauf aufbauend werden in den Kapiteln 3 und 4 die Grundzustandseigenschaften von Kern- und Neutronenmaterie für verschiedene Modellpotentiale untersucht. Zuerst werden die sog. Homework-Potentiale [Clar79] aufgegriffen, die im wesentlichen aus einem rein abstoßenden Yukawa-Core bestehen, um den Effekt der kurzreichweitigen Korrelationen zu untersuchen. Bereits in Zweiteilchennäherung ergeben sich Zustandsgleichungen für Neutronenmaterie, die bei niedrigen Dichten gut mit den Ergebnissen einiger wesentlich aufwendigerer Methoden, wie Fermi-Hypernetted-Chain- oder Variational-Monte-Carlo-Rechnungen, übereinstimmen. Bei hohen Dichten wird der Beitrag der nächsten Ordnung der Clusterentwicklung relevant. Durch numerische Berechnung der Dreiteilchenbeiträge wird gezeigt, daß sich auch bei den höchsten Dichten eine recht gute Übereinstimmung mit den Vergleichsrechnungen ergibt. Eine Alternative zur sehr aufwendigen numerischen Behandlung der höheren Ordnungen der Clusterentwicklung stellen dichteabhängige Korrelatoren dar. Dabei wird der Effekt der umgebenden Teilchen auf ein wechselwirkendes Paar durch eine dichteabhängige Abschwächung des Korrelators effektiv berücksichtigt. Die Wahl einer Dichteabhängigkeit mit lediglich einem Parameter, der am Ergebnis der Dreiteilchennäherung oder einer Vergleichsrechnung bei einer beliebigen Dichte fixiert wird, erlaubt eine hervorragende Beschreibung der Zustandsgleichung im gesamten Dichteintervall.

Auch die Untersuchung der korrelierten Zweiteilchendichte sowie der Besetzungszahlen im Impulsraum bestätigt, daß der unitäre Korrelator das geeignete Mittel zur Beschreibung wechselwirkungsinduzierter Korrelationen ist. Die Diagonalelemente der korrelierten Zweiteilchendichte zeigen ein charakteristisches Korrelationsloch im Bereich des Cores, in dem die Dichte auf Null reduziert ist. Die Besetzungszahlen im Impulsraum weisen eine Bevölkung von Zuständen oberhalb der Fermikante und eine entsprechende Entvölkerung unterhalb der Fermikante auf, die ein durch den Korrelator vermittelter Effekt der Wechselwirkung ist.

Im Kapitel 4 wird die Zustandsgleichung von Kernmaterie mit phänomenologischen, spin-isospinabhängigen Nukleon-Nukleon-Potentialen, den sog. Gammel-Thaler-Potentialen, untersucht. Hier steht der Vergleich mit der Methode der Jastrow-Korrelationsfunktionen im Vordergrund. Es zeigt sich, daß der unitäre Korrelator bereits im Rahmen der Zweiteilchennäherung den Jastrow-Korrelationen in Zwei- und Dreiteilchennäherung überlegen ist. Im Gegensatz zu diesen erlaubt der unitäre Korrelator wegen der Impulsabhängigkeit der korrelierten Wechselwirkung bereits in Zweiteilchennäherung eine Beschreibung der Sättigungseigenschaften.

Eine andere Gruppe korrelationsdominierter Systeme sind  ${}^4\text{He}$ -Flüssigkeiten bzw. kleine  ${}^4\text{He}$ -Tröpfchen, die in den Kapiteln 5 bzw. 6 behandelt werden. Die Wechselwirkung zwischen den  ${}^4\text{He}$ -Atomen wird in guter Übereinstimmung mit experimentellen Befunden durch das Lennard-Jones-6-12-Potential beschrieben. Die kurzreichweitigen Korrelationen spielen in diesen Systemen noch eine weit dominantere Rolle, da der Core der Wechselwirkung viel stärker und, bezogen auf den mittleren Teilchenabstand, viel weiter ausgedehnt ist als bei der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung. Zunächst wird der Fall einer homogenen  ${}^4\text{He}$ -Flüssigkeit im Grundzustand, in dem ein reines Bose-Einstein-Kondensat vorliegt, diskutiert. Der Versuchszustand ist in diesem Fall ein direktes Produkt von identischen, räumlich konstanten Einteilchenzuständen, so daß die impulsabhängigen Terme der effektiven Wechselwirkung keinen Beitrag liefern. Das hat zur Folge, daß die Zustandsgleichung in Zweiteilchennäherung eine lineare Funktion der

Dichte ist und die Sättigungseigenschaften des Systems nicht beschrieben werden. Dies wird erst durch Hinzunahme der Dreiteilchenbeiträge bzw. Verwendung eines dichteabhängigen Korrelators möglich. Unter Verwendung des in Zweiteilchennäherung optimierten Korrelators liefert die Dreiteilchennäherung eine zu niedrige Dichte und zu geringe Bindungsenergie für den Sättigungspunkt. Eine Optimierung des Korrelators in Dreiteilchennäherung würde in diesem Punkt eine Verbesserung bringen, ist allerdings mit sehr großem numerischen Aufwand verbunden. Mit Hilfe eines dichteabhängigen Korrelators in Zweiteilchennäherung ist es jedoch in einfacher Weise möglich, die Ergebnisse einer quasi-exakten Green's-Function-Monte-Carlo-Rechnung in der Umgebung des Sättigungspunktes mit hoher Genauigkeit zu reproduzieren, wobei lediglich ein Parameter der Dichteabhängigkeit anzupassen ist.

Mit dem im homogenen System fixierten Korrelator ohne und mit Dichteabhängigkeit können auch die Eigenschaften endlicher Cluster von  $^4\text{He}$ -Atomen, sog. Tröpfchen, beschrieben werden. In Kapitel 6 wird eine einfaches Variationsmodell mit einem einparametrischen gaußförmigen Versuchszustand benutzt, um Bindungsenergien und Radien von Tröpfchen mit bis zu 70 Teilchen zu berechnen. Die Energieminimierung in Zweiteilchennäherung führt zu einer deutlichen Überbindung und zu unphysikalisch hohen Dreiteilchenbeiträgen. Dagegen liefert der in Materie fixierte dichteabhängige Korrelator eine ausgezeichnete Beschreibung der Energien und eine gute Übereinstimmung der Radien im Vergleich zu quasi-exakten Monte-Carlo-Rechnungen.

Die diskutierten Systeme zeigen, daß die Methode der unitären Korrelatoren ein sehr mächtiges und universelles Werkzeug zur Beschreibung wechselwirkungsinduzierter kurzreichweitiger Korrelationen in Vielteilchensystemen ist. Mit Hilfe der Zweiteilchennäherung, bei hohen Dichten gegebenenfalls um eine effektive Dichteabhängigkeit erweitert, werden Ergebnisse erzielt, die sich durchaus mit denen sehr komplexer, massiv numerischer Methoden vergleichen lassen. Das gilt unabhängig von der Größe des Systems oder dem bosonischen oder fermionischen Charakter der Teilchen.

Aus den Untersuchungen ergibt sich eine allgemeine Vorschrift zur Anwendung der Methode der unitären Korrelatoren: Zuerst wird ein optimaler Korrelator im Zwei- oder Vielteilchensystem durch Energieminimierung in Zweiteilchennäherung festgelegt. Bei moderaten Dichten  $\rho$ , d.h. wenn der Kleinheitsparameter unter der empirischen Schranke  $\kappa = \rho V_C \lesssim 0.3$  liegt, liefert die Zweiteilchennäherung bereits eine befriedigende Beschreibung der kurzreichweitigen Korrelationen im Vielteilchensystem ( $V_C$  bezeichnet das Korrelationsvolumen). Bei höheren Dichten kann eine Dichteabhängigkeit, die an einem oder zwei experimentellen Datenpunkten oder komplexeren Rechnungen fixiert wird, zur effektiven Beschreibung der Beiträge jenseits der Zweiteilchennäherung verwendet werden. Auf diese Weise ergibt sich eine einfach anzuwendende und wirkungsvolle Methode, die kurzreichweitigen Korrelationen im Vielteilchensystem über einen großen Bereich von Dichten zu beschreiben.

Da die effektive Wechselwirkung in geschlossener Form gegeben ist, kann sie ohne weiteres in Modellen eingesetzt werden, die mit unkorrelierten Produktzuständen als Vielteilchenbasis arbeiten, z.B. das Schalenmodell mit Konfigurationsmischung. Damit sind Kernstrukturechnungen [Neff98, Schn96] sowie die dynamische Simulation von Kern-Kern-Kollisionen auf Basis realistischer Nukleon-Nukleon-Potentiale möglich [FMD00, FMD97a, FMD95].

In der bisherigen Formulierung beschränkt sich der unitäre Korrelator auf die vom Zentralteil der Wechselwirkung induzierten Korrelationen. Realistische Wechselwirkungen — wie das Bonn- oder Argonne-Potential [Mach89, WiSt95] — induzieren darüber

hinaus durch ihren Tensoranteil Korrelationen zwischen den Spins und der Relativkoordinate der Teilchen. Um diese Verknüpfung zwischen dem Winkelteil des Ortsraums und dem Spinraum auf gleicher Basis wie die Zentralkorrelationen zu behandeln, wäre die Formulierung einer entsprechenden Transformation im Orts- und Spinraum und des zugehörigen unitären Operators erforderlich. Ein Problem ergibt sich jedoch aus der großen Reichweite der Tensorkorrelationen, die eine Verwendung der Zweiteilchennäherung fragwürdig erscheinen läßt.

TEIL II · Für die im zweiten Teil der Arbeit behandelten, stark verdünnten atomaren Gase ist die Methode der unitären Korrelatoren „überdimensioniert“. Der mittlere Teilchenabstand und typische Wellenlängen der Relativbewegung sind im Vergleich zur Wechselwirkungsreichweite so groß, daß die Teilchen nur eine gemittelte Wechselwirkung erfahren. Die detaillierte Form der Radialabhängigkeit des Potentials ist nicht relevant. Für eine Mean-Field-Beschreibung des Problems bietet es sich an, die volle Atom-Atom-Wechselwirkung durch eine *effektive Kontaktwechselwirkung* zu ersetzen [RoFe00b, RoFe00a]. Sie wird so konstruiert, daß der Erwartungswert des effektiven Hamiltonoperators im Zweiteilchensystem gebildet mit Zuständen, die keine Korrelationen enthalten, das exakte Zweiteilchenspektrum reproduziert. In Kapitel 7 wird gezeigt, daß diese Forderung auf eine energieabhängige Kontaktwechselwirkung führt, deren Stärke in den einzelnen Partialwellen proportional zur entsprechenden Streuphase ist. Anhand eines anziehenden Kastenpotentials wird demonstriert, daß die effektive Kontaktwechselwirkung das exakte Zweiteilchenspektrum mit hoher Genauigkeit reproduziert. Eine Vereinfachung ergibt sich, wenn man die Streuphasen in niedrigster Ordnung des Relativimpulses durch die Streulängen ausdrückt. Dies führt zu energieunabhängigen Wechselwirkungsstärken, bedeutet jedoch auch eine Einschränkung des Gültigkeitsbereichs.

Im achten Kapitel wird der s- und p-Wellenbeitrag der effektiven Kontaktwechselwirkung benutzt, um die Energiedichte eines verdünnten mehrkomponentigen Fermigas in einem äußeren Potential bei Temperatur Null abzuleiten. Dazu wird zunächst die Energiedichte des homogenen Fermigas in einer Mean-Field-Rechnung als Funktion der Fermiimpulse der einzelnen Komponenten bestimmt. Im Rahmen der Thomas-Fermi-Näherung wird daraus die Energiedichte des inhomogenen Systems im äußeren Potential als Funktional der lokalen Fermiimpulse gebildet. Der Grundzustand des Vielteilchensystems wird im Sinne des Hohenberg-Kohn-Theorems durch Funktionalvariation der Dichte bzw. der lokalen Fermiimpulse bestimmt.

Darauf aufbauend werden im neunten Kapitel die Eigenschaften ein- und zweikomponentiger ultrakalter Fermigase in externen Potentialen untersucht. Im Mittelpunkt steht der Einfluß der s- und p-Wellenwechselwirkung, deren Stärke durch die entsprechenden Streulängen charakterisiert ist, auf die Struktur und Stabilität der Gase. Im einkomponentigen System ist der p-Wellenterm der führende Wechselwirkungsbeitrag, da die s-Wellenwechselwirkung aufgrund des Pauliprinzips unterdrückt ist. Es wird gezeigt, daß die p-Wellenwechselwirkung bei typischen Teilchenzahlen ( $N = 10^6$ ) deutlichen Einfluß auf die Form der Dichteprofile haben kann. Ferner tritt für effektiv anziehende p-Wellenwechselwirkungen, d.h. negative p-Wellenstreulängen, oberhalb einer kritischen Dichte bzw. Teilchenzahl eine Instabilität auf: Der metastabile Zustand des verdünnten Fermigas kollabiert in einen gebundenen Zustand hoher Dichte. Es werden explizite Stabilitätsbedingungen als Funktion der p-Wellenstreulänge und des kritischen Fermiimpulses bzw. der Teilchenzahl abgeleitet.



Im zweikomponentigen Fermigas tragen sowohl die s- als auch die p-Wellenwechselwirkung bei und führen zu verschiedenen neuartigen Phänomenen. Wie im ein-komponentigen System rufen anziehende Wechselwirkungen, d.h. negative s- oder p-Wellenstreulängen, eine Instabilität des verdünnten Fermigases gegen Kollaps in einen Hochdichtezustand hervor. Wiederum werden explizite Stabilitätsbedingungen als Funktion der beiden Streulängen und des Fermiimpulses bzw. der Teilchenzahl abgeleitet. Aus dem Zusammenspiel der beiden Wechselwirkungskomponenten ergeben sich einige Besonderheiten: Ist eine der Komponenten anziehend und die andere abstoßend, so führt letztere zu einer Stabilisierung des Systems gegen den vom anziehenden Wechselwirkungsterm induzierten Kollaps, d.h. die kritische Teilchenzahl erhöht sich. Im Falle anziehender s-Wellen- und abstoßender p-Wellenwechselwirkung kommt es sogar zur absoluten Stabilisierung des System sofern die p-Wellenstreulänge rund ein Drittel des Betrages der s-Wellenstreulänge erreicht. Trotz der s-Wellenanziehung bleibt das System für beliebige Teilchenzahlen metastabil. Bei Werten der p-Wellenstreulängen an der unteren Grenze zur absoluten Stabilisierung tritt eine neuartige p-wellenstabilisierte Hochdichtephase auf. Bei Überschreiten einer kritischen Teilchenzahl entsteht im Zentrum der Falle eine Region, in der die Dichte sehr schnell oder sogar sprunghaft um etwa eine Größenordnung anwächst.

Neben dem Kollaps des zweikomponentigen Gases kann es infolge abstoßender s-Wellenwechselwirkungen auch zu einer räumlichen Separation der beiden Komponenten kommen. Abstoßende p-Wellenwechselwirkung bewirken hier wiederum eine Erhöhung der kritischen Teilchenzahl bzw. jenseits einer gewissen Streulänge eine absolute Stabilisierung gegen Komponentenseparation. Im Falle negativer p-Wellenstreulängen kommt es zu einer Überlagerung zwischen Komponentenseparation infolge der s-Wellenabstoßung und Kollaps induziert durch die p-Wellenanziehung<sup>1</sup>.

Die Untersuchungen zeigen, daß die p-Wellenwechselwirkung, entgegen der häufig vertretenen Meinung, von großer Bedeutung für Struktur und Stabilität der ultrakalten Fermigase sein kann. In Abhängigkeit von der relativen Stärke von s- und p-Wellenwechselwirkung können vollkommen neuartige Phänomene auftreten, die insbesondere im Hinblick auf die Suche nach einer superfluiden Phase in diesen Systemen von Bedeutung sind. Es ist daher nicht gerechtfertigt, die p-Wellenwechselwirkung von vornherein zu vernachlässigen.

An das hier durchgeführte Studium der statischen Eigenschaften schließt sich unmittelbar die Frage nach dem Einfluß der s- und p-Wellenwechselwirkung auf die Dynamik des ultrakalten Fermigases an. Im ersten Schritt wäre ein Studium kollektiver Anregungen, wie z.B. Schwingungen der Gase im äußeren Fallenpotential oder kollektive Moden innerhalb des Gases, denkbar. Ein weiterer Themenkomplex ist die mögliche Bildung von Cooperpaaren und der Übergang zu einer superfluiden Phase sowie insbesondere der Einfluß der p-Wellenwechselwirkung auf diese Prozesse.

---

<sup>1</sup>Als Ergänzung zum zweiten Teil dieser Arbeit ist eine Webseite (<http://theory.gsi.de/~trap/>) entstanden, die einige der in Kapitel 9 diskutierten Phänomene in ultrakalten Fermigasen mit multimedialen Mitteln veranschaulicht.



*Teil I*

---

*Die Methode der unitären Korrelatoren  
in Anwendung auf  
stark wechselwirkende Quantenflüssigkeiten*



## Einleitung zu Teil I

Eine generische Eigenschaft vieler mikroskopischer Wechselwirkungen ist das Auftreten einer sehr starken Abstoßung zwischen zwei Teilchen, wenn deren Abstand klein wird. Zwei Beispiele von großer Bedeutung sind die Wechselwirkung zweier Nukleonen und die van-der-Waals-Wechselwirkung zweier Atome. Im Bild eines Zentralpotentials spiegelt sich diese kurzreichweitige Abstoßung in einem steilen Anstieg des Potentials zu kleinen Teilchenabständen hin wider, es bildet sich der sog. *Core*<sup>2</sup>. Bereits aus energetischen Erwägungen wird klar, daß sich die Teilchen eines Vielteilchensystems nicht in Abständen kleiner dem Radius des Cores aufhalten, d.h. die Wahrscheinlichkeit zwei Teilchen in einem Abstand kleiner dem Coreradius zu finden, ist verschwindend. Formal wird diese Wahrscheinlichkeit durch die Diagonalelemente der Zweiteilchendichtematrix in Ortsdarstellung beschrieben, sie zeigt bei kleinen Abständen ein charakteristisches Loch, in dem die Dichte praktisch auf Null reduziert ist. Die Wechselwirkung induziert somit eine spezielle *Korrelation* der Orte der einzelnen Teilchen.

Die kurzreichweitigen Korrelationen stellen eine Herausforderung bei der theoretischen Behandlung des wechselwirkenden Vielteilchenproblems dar. Viele Methoden, das quantenmechanische Vielteilchenproblem näherungsweise zu lösen, stützen sich auf die Annahme unabhängiger Teilchen, die die Wechselwirkung mit den anderen Teilchen des Systems nur durch ein mittleres Einteilchenpotential erfahren. Derartige *Mean-Field*-Modelle sind zwar numerisch besonders einfach, können aber kurzreichweitige Korrelationen nicht beschreiben. Das verhindert die Anwendung solcher Modelle auf realistische Wechselwirkungen, die starke kurzreichweitige Abstoßungen enthalten und damit Korrelationen erzwingen. Ein Ausweg aus diesem Dilemma besteht im Übergang von der realistischen zu einer *effektiven Wechselwirkung*, die den Fähigkeiten des Modells angepaßt ist. Diese muß so konstruiert sein, daß die für die Anwendung relevanten Eigenschaften der vollen Wechselwirkung reproduziert werden.

In der Kernphysik werden eine Reihe von Methoden zur Ableitung der effektiven Wechselwirkung verwendet. Die bekannteste darunter ist die Bruecknersche *G*-Matrix [Day67, RiSc80]. Die *G*-Matrix beschreibt eine energieabhängige effektive Wechselwirkung, die dadurch definiert ist, daß *G* angewendet auf einen Zweiteilchenzustand ohne Korrelationen gleich der vollen Wechselwirkung angewendet auf den exakten Zustand ist. Die Lösung des nuklearen Vielteilchenproblems mit der *G*-Matrix erfordert komplexe selbstkonsistente Verfahren (z.B. Brueckner-Hartree-Fock), in denen sowohl die Zustände als auch die *G*-Matrix iterativ zu bestimmen sind. Ein anderer weitverbreiteter Ansatz sind die Jastrow-Korrelationsfunktionen [Jast55, Clar79]. Sie berücksichtigen kurzreichweitige Korrelationen durch Multiplikation der unkorrelierten Zweiteilchenwellenfunktion mit einer abstandsabhängigen Funktion  $f(r)$ , die dem Profil des Korrelationslochs entspricht. Diese Multiplikation verändert die Norm der Wellenfunktion,

---

<sup>2</sup>Die speziellere Bezeichnung „Hard-Core“ wird hier nur für Potentiale, die innerhalb des Coreradius auf Unendlich springen, benutzt. Potentiale, die mit großer aber endlicher Steigung anwachsen, werden im Gegensatz dazu als „Soft-Core“-Potentiale bezeichnet.

so daß die korrelierte Wellenfunktion explizit renormiert werden muß. Dies macht die Definition einer zustandsunabhängigen effektiven Wechselwirkung problematisch. Auf der Basis der Jastrow-Korrelationen wurden sehr mächtige aber komplexe Methoden, wie z.B. die (Fermi-)Hypernetted-Chain-Summation, zur Behandlung des Vielteilchenproblems unter Einwirkung von Korrelationen entwickelt. Sie zählen zusammen mit verschiedenen Monte-Carlo-Rechnungen zu den verlässlichsten Werkzeugen der modernen nicht-relativistischen Vielteilchenphysik.

Dieser Teil der Arbeit beschäftigt sich mit einem alternativen Zugang, der sog. *Methode der unitären Korrelatoren*. Die kurzreichweitigen Korrelationen werden durch eine unitäre Transformation der Wechselwirkung oder der Vielteilchenzustände behandelt. Der unitäre Korrelationsoperator ist so konstruiert, daß er, angewendet auf eine Zweiteilchenwellenfunktion, die Stärke aus dem Bereich der kurzreichweitigen Abstoßung der Wechselwirkung „herausschiebt“ und so das Korrelationsloch erzeugt. Der formale Apparat und einige Anwendungen dieser neuen Methode wurden bereits in einer Diplom- und einer Doktorarbeit [Roth97, Schn96] und der darauffolgenden Veröffentlichung [UCOM98] entwickelt. Im ersten Kapitel dieser Arbeit werden die Grundlagen kurz zusammengefaßt und bezüglich der Mehrteilchenkorrelationen erweitert. Die weiteren Kapitel des ersten Teils befassen sich mit der Anwendung der Methode der unitären Korrelatoren auf bosonische und fermionische Quantenflüssigkeiten hoher Dichte. Im zweiten Kapitel werden analytische Ausdrücke für die Zustandsgleichung und die Dichten eines stark wechselwirkenden Fermigases unter Verwendung der unitären Korrelatoren abgeleitet. Damit werden in den Kapiteln 3 und 4 die Eigenschaften von Neutronenmaterie unter Verwendung der sogenannten Homework-Potentiale bzw. von Kernmaterie mit phänomenologischen Nukleon-Nukleon-Wechselwirkungen untersucht und mit den Ergebnissen von Fermi-Hypernetted-Chain- und Variational-Monte-Carlo-Rechnungen verglichen. In den Kapiteln 5 und 6 wird der unitäre Korrelator auf das bosonische  ${}^4\text{He}$ -System angewendet. Das verwendete Lennard-Jones-Potential besitzt einen weit dominanteren Core als typische Nukleon-Nukleon-Wechselwirkungen. Insbesondere werden die Zustandsgleichung der homogenen  ${}^4\text{He}$ -Flüssigkeit und die Bindungsenergien und Radien kleiner  ${}^4\text{He}$ -Tröpfchen berechnet. Für all diese Systeme existieren eine Reihe von Rechnungen mit elaborierten Methoden, die im Vergleich eine Beurteilung der Qualität der wesentlich einfacheren Methode der unitären Korrelatoren ermöglichen.

## Kapitel 1

---

# Die Methode der unitären Korrelatoren

Dieses Kapitel umreißt die Grundelemente der Methode der unitären Korrelatoren, wie sie bereits in vorangehenden Arbeiten [UCOM98, Roth97] dargestellt wurden und diskutiert einige neue Entwicklungen bezüglich der Behandlung von Korrelationen im Vielteilchenraum. Es bildet die konzeptionelle Grundlage aller weiteren Untersuchungen im ersten Teil dieser Arbeit.

### 1.1 Konzept

Die Methode der unitären Korrelatoren (kurz UCOM für „Unitary Correlation Operator Method“) versucht eine Brücke zwischen realistischen Wechselwirkungen und einem einfachen Näherungsverfahren zur Lösung des Vielteilchenproblems, z.B. einem Mean-Field-Modell, zu schlagen. Das Spektrum der zu untersuchenden Systeme reicht vom Zweiteilchensystem über Systeme endlicher Teilchenzahl (3-1000) bis hin zur unendlichen homogenen Materie. Dabei beschränkt man sich auf eine nicht-relativistische Behandlung und geht der Einfachheit halber von einem reinen Zweiteilchenpotential zur Beschreibung der Wechselwirkung aus. Formal kann die Methode jedoch auf Mehrteilchenwechselwirkungen verallgemeinert werden.

Der Graben, der sich zwischen einem realistischen Potential und der Behandlung des Vielteilchenproblems auf Basis von antisymmetrisierten oder symmetrisierten Produktzuständen öffnet, wird von den kurzreichweitigen, wechselwirkungsinduzierten Korrelationen verursacht. Der abstoßende Core typischer Nukleon-Nukleon- oder Atom-Atom-Wechselwirkungen bewirkt, daß alle Teilchenpaare des Vielteilchensystems im wesentlichen bei Abständen größer dem Radius des Cores vorzufinden sind. In den Diagonalelementen der Zweiteilchendichtematrix in Ortsdarstellung zeigt sich ein charakteristisches Korrelationsloch (das deutlich ausgeprägter ist als das Austauschloch für Fermionen). In einem Modell, dessen Modellraum durch (anti-)symmetrisierte Einteilchen-Produktzustände aufgespannt wird, können derartige Strukturen nicht beschrieben werden. Der Versuch, Matricelemente der vollen Wechselwirkung mit Produktzuständen zu berechnen, führt unweigerlich auf Divergenzen.

Es gibt prinzipiell zwei Wege, dieses Problem zu beheben: Erstens, die *Erweiterung des Modellraums*, d.h. der Übergang von Einteilchen-Produktzuständen des einfachsten Mean-Field-Modells zu einer Basis, die kurzreichweitige Korrelationen beschreiben

kann. Zweitens, die Verwendung einer *effektiven Wechselwirkung*, deren Core in geeigneter Weise „gezähmt“ ist. Mit der Methode der unitären Korrelatoren werden beide Wege simultan beschritten. Das Verfahren erlaubt es, je nach den Erfordernissen der Anwendung, entweder den Modellraum zu transformieren oder die Wechselwirkung zu zählen.

Eine derartige Transformation soll durch den unitären *Korrelationsoperator* oder kurz Korrelator

$$\mathbf{C}^\dagger \mathbf{C} = 1 \quad (1.1)$$

beschrieben werden. Die Anwendung dieses Korrelationsoperators auf einen Vielteilchenzustand des Modellraumes definiert einen korrelierten Zustand

$$|\tilde{\Psi}\rangle := \mathbf{C} |\Psi\rangle. \quad (1.2)$$

Die Tilden kennzeichnen hier und im folgenden korrelierte Größen. Aufgrund der Unitarität des Korrelators hat der korrelierte Zustand dieselbe Norm wie der unkorrelierte:  $\langle \tilde{\Psi} | \tilde{\Psi} \rangle = \langle \Psi | \Psi \rangle$ . Berechnet man das Matrixelement eines beliebigen Operators  $\mathbf{O}$  mit korrelierten Zuständen

$$\langle \tilde{\Psi} | \mathbf{O} | \tilde{\Psi}' \rangle = \langle \Psi | \mathbf{C}^\dagger \mathbf{O} \mathbf{C} | \Psi' \rangle = \langle \Psi | \tilde{\mathbf{O}} | \Psi' \rangle, \quad (1.3)$$

dann wird die Definition des korrelierten Operators offensichtlich

$$\tilde{\mathbf{O}} := \mathbf{C}^\dagger \mathbf{O} \mathbf{C} = \mathbf{C}^{-1} \mathbf{O} \mathbf{C}. \quad (1.4)$$

Physikalische Observablen, wie Erwartungswerte oder Matrixelemente, sind also per Constructionem unabhängig davon, welche der beiden Beschreibungen gewählt wird.

Es bleibt die Frage, wie der unitäre Korrelationsoperator  $\mathbf{C}$  konkret zu konstruieren ist. Besonders nützlich ist eine Form, die es erlaubt, korrelierte Zustände und korrelierte Operatoren, wenigstens in den einfachsten Fällen, z.B. dem Zweiteilchensystem, in geschlossener analytischer Form darzustellen. Eine Möglichkeit hierzu zeigt das anschauliche Bild des Korrelationslochs einer Relativwellenfunktion im Zweiteilchensystem: Die starke kurzreichweitige Abstoßung „verschiebt“ Stärke aus dem Bereich des Cores radial zu größeren Abständen. Dementsprechend kann ein unitärer Korrelationsoperator definiert werden, der ebendiese *abstandsabhängige Radialverschiebung in der Relativkoordinate* des Zweiteilchensystems generiert. Die Korrelationen werden dem Vielteilchenzustand durch eine spezielle Koordinatentransformation, die in Form eines unitären Operators formuliert werden kann, aufgeprägt. Dieser Ansatz bildet die Grundlage der Methode der unitären Korrelatoren, die im folgenden entwickelt wird.

## 1.2 Korrelator im Zweiteilchenraum

In diesem Abschnitt wird die Konstruktion des unitären Korrelationsoperators im Zweiteilchenraum, sowie die Struktur korrelierter Zustände und korrelierter Operatoren zusammengefaßt. Eine detailliertere Diskussion der formalen Eigenschaften und eine Reihe aufschlußreicher Beispiele findet sich in der Diplomarbeit [Roth97] und der daraus hervorgegangenen Veröffentlichung [UCOM98].



### 1.2.1 Unitärer Korrelationsoperator

Dem Konzept der Methode der unitären Korrelatoren folgend, ist ein Korrelationsoperator  $\mathbf{c}$  zu konstruieren, der erstens unitär ist und zweitens eine abstandsabhängige Verschiebung in der Relativkoordinate des Zweiteilchensystems beschreibt. Der kleine Buchstabe  $\mathbf{c}$  kennzeichnet hier speziell den Korrelator im Zweiteilchenraum. Im Sinne der Unitarität  $\mathbf{c}^\dagger \mathbf{c} = 1$  läßt sich der Korrelationsoperator als Exponential eines hermiteschen Generators  $\mathbf{g} = \mathbf{g}^\dagger$  ausdrücken

$$\mathbf{c} = \exp(-i \mathbf{g}). \quad (1.5)$$

Die Struktur des Generators richtet sich nach der Art der Transformation, die der Korrelationsoperator beschreiben soll. Für Translationen in der Relativkoordinate eines Teilchenpaares ist der Relativimpuls

$$\vec{\mathbf{q}} = \frac{1}{2} [\vec{\mathbf{p}}(1) - \vec{\mathbf{p}}(2)] \quad (1.6)$$

der geeignete Generator. Translationen entlang der Verbindungsachse zweier Teilchen werden insbesondere durch dessen Projektion auf den Abstandsvektor  $\vec{\mathbf{r}} = \vec{\mathbf{x}}(1) - \vec{\mathbf{x}}(2)$  beschrieben, das führt auf den sog. Radialimpulsoperator

$$\mathbf{q}_r = \frac{\vec{\mathbf{r}}}{r} \vec{\mathbf{q}} = \vec{\mathbf{n}}_r \vec{\mathbf{q}}. \quad (1.7)$$

Der Operator  $\vec{\mathbf{n}}_r = \vec{\mathbf{r}}/r$  bezeichnet einen Einheitsvektor in Richtung der Relativkoordinate. An dieser Stelle sei auf die Zusammenstellung der verwendeten Notationen auf Seite 220 verwiesen.

Der hermitesche Generator einer abstandsabhängigen Radialverschiebung läßt sich damit folgendermaßen formulieren:

$$\mathbf{g} = \frac{1}{2} [s(\mathbf{r}) \mathbf{q}_r + \mathbf{q}_r s(\mathbf{r})] = s(\mathbf{r}) \mathbf{q}_r - \frac{i}{2} s'(\mathbf{r}). \quad (1.8)$$

Die Funktion  $s(r)$  definiert die Radialabhängigkeit der Translation. Sie kann näherungsweise mit der Distanz, um die zwei Teilchen im Abstand  $r$  verschoben werden, identifiziert werden. Ihre Form ist aus den Eigenschaften der durch das exakte Zweiteilchenpotential induzierten Korrelationen zu bestimmen.

Der so konstruierte Korrelator wirkt nur im Orts-Impulsteil des Zweiteilchen-Hilbertraumes und da wiederum nur auf den Radialteil. Somit kommutiert der Generator  $\mathbf{g}$  und damit auch der Korrelationsoperator  $\mathbf{c}$  mit den Operatoren des Schwerpunktsortes  $\vec{\mathbf{X}}$ , des Schwerpunktsimpulses  $\vec{\mathbf{P}}$  sowie des Drehimpulses  $\vec{\mathbf{L}} = \vec{\mathbf{r}} \times \vec{\mathbf{q}}$

$$[\mathbf{c}, \vec{\mathbf{X}}] = 0, \quad [\mathbf{c}, \vec{\mathbf{P}}] = 0, \quad [\mathbf{c}, \vec{\mathbf{L}}] = 0. \quad (1.9)$$

Nichtverschwindende Kommutatoren ergeben sich nur für Operatoren, die den Betrag der Relativkoordinate  $\mathbf{r}$  oder den Radialimpuls  $\mathbf{q}_r$  enthalten. In allen übrigen Teilen des Zweiteilchen-Hilbertraumes, z.B. dem Spin- und Isospinraum, entspricht der Korrelator dem Einsoperator.

Diese Eigenschaft kann genutzt werden, um den Ansatz des Korrelators zu verallgemeinern. Gegeben sei ein Satz orthogonaler Projektionsoperatoren  $\Pi_i$ , die mit dem Korrelationsoperator bzw. dem Generator vertauschen

$$\Pi_i \Pi_j = \Pi_i \delta_{ij} \quad \text{und} \quad [\mathbf{c}, \Pi_i] = [\mathbf{g}, \Pi_i] = 0. \quad (1.10)$$

Damit kann der Generator in eine Summe von Generatoren  $\mathbf{g}_i$  in den durch die Projektoren definierten orthogonalen Unterräume zerlegt werden

$$\hat{\mathbf{g}} = \sum_i \mathbf{g}_i \Pi_i \quad \text{mit} \quad \mathbf{g}_i = \frac{1}{2} [s_i(\mathbf{r}) \mathbf{q}_r + \mathbf{q}_r s_i(\mathbf{r})]. \quad (1.11)$$

In jedem der Teilräume kann eine andere Radialverschiebung  $s_i(r)$  angesetzt werden. Da die Projektoren nach Voraussetzung mit den Generatoren  $\mathbf{g}_i$  vertauschen, ist dieser verallgemeinerte Generator weiterhin hermitesch. Wie sich zeigt, nimmt der damit konstruierte unitäre Korrelationsoperator folgende Gestalt an:

$$\hat{\mathbf{c}} = \sum_i \mathbf{c}_i \Pi_i \quad \text{mit} \quad \mathbf{c}_i = \exp(-i \mathbf{g}_i). \quad (1.12)$$

In dieser Formulierung ist es leicht möglich, spin- und isospinabhängige Korrelatoren zu konstruieren, die im Hinblick auf die Anwendung in Kernstrukturrechnungen wichtig sind. Dazu werden vier Projektoren  $\Pi_{ST}$  auf die Quantenzahlen des gekoppelten Spins und Isospins im Zweinukleonensystem definiert. Der Korrelator kann vermöge der Verschiebefunktionen  $s_{ST}(r)$  in jedem Spin-Isospinkanale unterschiedliche Korrelationen induzieren und so der Spin-Isospinstruktur der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung Rechnung tragen.

### 1.2.2 Korrelierte Wellenfunktion

Unter Verwendung des Ansatzes für den unitären Korrelationsoperator lassen sich geschlossene Ausdrücke für korrelierte Zweiteilchenwellenfunktionen in Ortsdarstellung ableiten. Der Korrelationsoperator wirkt per Constructionem nur auf den Relativanteil  $|\phi\rangle$  eines Zweiteilchenzustandes  $|\psi\rangle = |\Phi\rangle \otimes |\phi\rangle$ . Der korrelierte Relativanteil ist formal durch

$$|\tilde{\phi}\rangle = \mathbf{c} |\phi\rangle \quad (1.13)$$

definiert. Wiederum kennzeichnen die Tilden korrelierte Größen. Der Schwerpunktsanteil  $|\Phi\rangle$  des Zustandes ist invariant gegenüber Anwendung des Korrelationsoperators, so daß der korrelierte Zweiteilchenzustand durch  $|\tilde{\psi}\rangle = |\Phi\rangle \otimes |\tilde{\phi}\rangle$  gegeben ist.

Einsetzen des Korrelationsoperators nach (1.5) und (1.8) führt nach kurzer Rechnung auf folgende Formen für die korrelierte Relativwellenfunktion in Ortsdarstellung

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | \mathbf{c} | \phi \rangle &= \mathcal{R}_-(r) \langle \vec{R}_-(\vec{r}) | \phi \rangle \\ \langle \vec{r} | \mathbf{c}^\dagger | \phi \rangle &= \mathcal{R}_+(r) \langle \vec{R}_+(\vec{r}) | \phi \rangle \end{aligned} \quad (1.14)$$

mit

$$\vec{R}_\pm(\vec{r}) = R_\pm(r) \vec{n}_r \quad \text{und} \quad \mathcal{R}_\pm(r) = \frac{R_\pm(r)}{r} \sqrt{R'_\pm(r)}. \quad (1.15)$$

Die Funktionen  $R_+(r)$  bzw.  $R_-(r)$  werden als *Korrelationsfunktionen* bezeichnet. Sie geben an, auf welchen Abstand zwei Teilchen mit ursprünglichem Abstand  $r$  durch Anwendung des Korrelationsoperators verschoben werden. Die Funktionen  $\mathcal{R}_\pm(r)$  beschreiben einen Metrikfaktor, der die Normerhaltung bei Transformation der Radialkoordinate mit  $R_\pm(r)$  sichert. Beide Korrelationsfunktionen sind invers zueinander

$$R_\pm[R_\mp(r)] = r, \quad (1.16)$$

positiv definit, streng monoton, stetig differenzierbar und verschwinden im Ursprung. Ferner sind sie mit der Funktion  $s(r)$ , die im Exponenten des Korrelationsoperators auftritt, durch die implizite Integralgleichung

$$\int_r^{R_{\pm}} \frac{d\xi}{s(\xi)} = \pm 1 \quad (1.17)$$

verknüpft. Unter der Annahme, daß die Funktion  $s(r)$  nur schwach veränderlich ist, ergibt sich  $R_{\pm}(r) \approx r \pm s(r)$ . In dieser Näherung kann die Funktion  $s(r)$  demnach als Distanz der Radialverschiebung für zwei Teilchen im Abstand  $r$  interpretiert werden.

Die Wirkung des Korrelationsoperators im Zweiteilchensystem ist durch die Korrelationsfunktion  $R_+(r)$  bzw.  $R_-(r)$  vollständig bestimmt, die Funktion  $s(r)$  wird nicht explizit benötigt. In der Anwendung genügt es daher, die durch die Zweiteilchenwechselwirkung induzierten kurzreichweitigen Korrelationen durch einen geeigneten Ansatz für eine der beiden Korrelationsfunktionen zu parametrisieren, die andere ergibt sich daraus als Inverse. Wie diese optimale Korrelationsfunktion für eine konkrete Anwendung zu bestimmen ist, wird in den folgenden Kapiteln diskutiert.

Eine zur Charakterisierung der Eigenschaften einer gegebenen Korrelationsfunktion nützliche Größe ist das sog. *Korrelationsvolumen*

$$V_C = \int d^3r [\mathcal{R}_-(r) - 1]^2 = \int d^3r [1 - \mathcal{R}_+(r)]^2. \quad (1.18)$$

Es beschreibt die Norm der Defektwellenfunktion, die als Differenz zwischen korrelierter und unkorrelierter konstanter Wellenfunktion definiert ist. Anschaulich kann  $V_C$  als Volumen des Korrelationslochs interpretiert werden. Ein anderes Maß, das häufig im Zusammenhang mit der Bruecknerschen  $G$ -Matrix verwendet wird, ist die sog. *Ausheillänge*  $r_h$ . Sie ist durch den Schnittpunkt der korrelierten mit der unkorrelierten konstanten Wellenfunktion definiert, d.h. durch die erste Nullstelle der Funktion  $[\mathcal{R}_-(r) - 1]$ .

### 1.2.3 Korrelierte Operatoren

Der große Vorteil eines unitären Korrelationsoperators ist, daß er äquivalent auf Zustände und auf Operatoren angewendet werden kann, um ein korreliertes Matrixelement zu berechnen. Formal ist ein *korrelierter Operator*  $\tilde{\mathbf{O}}$  durch die Ähnlichkeitstransformation

$$\tilde{\mathbf{O}} = \mathbf{c}^\dagger \mathbf{O} \mathbf{c} \quad (1.19)$$

definiert. Mit Hilfe der korrelierten Wellenfunktionen (1.14) lassen sich die Ortsraummatrixelemente einiger elementarer Operatoren im Zweiteilchenraum explizit berechnen.

Für die Behandlung korrelierter Ortsoperatoren im Zweiteilchensystem bietet sich eine Darstellung in Schwerpunkts-  $\vec{X}$  und Relativkoordinate  $\vec{r}$  an. Für die zugeordneten Operatoren ergibt eine einfache Rechnung folgende Beziehungen

$$\mathbf{c}^\dagger \vec{X} \mathbf{c} = \vec{X}, \quad \mathbf{c}^\dagger \vec{r} \mathbf{c} = \vec{R}_+(\vec{r}). \quad (1.20)$$

Der Operator der Relativkoordinate wird durch Anwendung des Korrelationsoperators auf die mit der Korrelationsfunktion  $R_+$  transformierte Relativkoordinate abgebildet. Dagegen ist der Schwerpunktsoperator invariant.

Eine entsprechende Rechnung läßt sich für die Impulsoperatoren im Zweiteilchensystem durchführen. Neben der Darstellung als Schwerpunktsimpuls  $\vec{\mathbf{P}}$  und Relativimpuls  $\vec{\mathbf{q}}$  bietet sich die Zerlegung des Relativimpulses in Radialimpuls  $\mathbf{q}_r = \vec{\mathbf{n}}_r \vec{\mathbf{q}}$  und Drehimpuls  $\vec{\mathbf{L}} = \vec{\mathbf{r}} \times \vec{\mathbf{q}}$  an. Für diese Operatoren gilt

$$\mathbf{c}^\dagger \vec{\mathbf{P}} \mathbf{c} = \vec{\mathbf{P}}, \quad \mathbf{c}^\dagger \vec{\mathbf{L}} \mathbf{c} = \vec{\mathbf{L}}, \quad \mathbf{c}^\dagger \mathbf{q}_r \mathbf{c} = \frac{1}{r\sqrt{R'_+(r)}} \mathbf{q}_r \frac{r}{\sqrt{R'_+(r)}}. \quad (1.21)$$

Sowohl der Schwerpunktsimpuls als auch der Drehimpuls bleiben bei Transformation mit dem Korrelationsoperator unverändert. Der Radialimpuls dagegen zeigt eine Abhängigkeit von der Ableitung der Korrelationsfunktion  $R_+(r)$ .

Aufgrund des unitären Charakters der Transformation läßt sich leicht auf das Transformationsverhalten von Operatorfunktionen schließen

$$\tilde{F}(\mathbf{O}) = \mathbf{c}^\dagger F(\mathbf{O}) \mathbf{c} = F(\mathbf{c}^\dagger \mathbf{O} \mathbf{c}) = F(\tilde{\mathbf{O}}), \quad (1.22)$$

d.h. die korrelierte Operatorfunktion ist durch die unkorrelierte Funktion mit korreliertem Argument gegeben. Diese Relation kann durch Darstellung der Operatorfunktion als Potenzreihe und Ausnutzen der Unitarität des Korrelationsoperators bewiesen werden. Damit lassen sich die Eigenschaften der korrelierten elementaren Operatoren auf komplexere Operatorfunktionen übertragen.

Von besonderem Interesse ist der Hamiltonoperator des Zweiteilchensystems, bestehend aus kinetischer Energie und einem Zweiteilchenpotential

$$\mathbf{H} = \mathbf{T} + v(\mathbf{r}). \quad (1.23)$$

Der korrelierte Hamiltonoperator

$$\tilde{\mathbf{H}} = \mathbf{c}^\dagger \mathbf{H} \mathbf{c} = \mathbf{c}^\dagger \mathbf{T} \mathbf{c} + \mathbf{c}^\dagger v(\mathbf{r}) \mathbf{c} \quad (1.24)$$

ist dementsprechend aus korrelierter kinetischer Energie und korreliertem Zweiteilchenpotential zusammengesetzt. Da letzteres nur eine Funktion des Abstands sein soll, gilt entsprechend dem Transformationsverhalten des Operators  $\mathbf{r}$

$$\tilde{v}(\mathbf{r}) = \mathbf{c}^\dagger v(\mathbf{r}) \mathbf{c} = v(R_+(\mathbf{r})). \quad (1.25)$$

Das korrelierte Zentralpotential ist durch das unkorrelierte Potential mit transformierter Radialabhängigkeit  $r \rightarrow R_+(r)$  gegeben.

Für die Berechnung der korrelierten kinetischen Energie bietet sich eine Zerlegung in Schwerpunkts- und Relativanteil an, letzterer kann wiederum in einen Radial- und einen Winkelteil aufgespalten werden

$$\mathbf{T} = \mathbf{t}(1) + \mathbf{t}(2) = \mathbf{t}_{\text{cm}} + \mathbf{t}_{\text{rel}} = \mathbf{t}_{\text{cm}} + \mathbf{t}_r + \mathbf{t}_\Omega. \quad (1.26)$$

Für die einzelnen Komponenten gilt

$$\begin{aligned} \mathbf{t}_{\text{cm}} &= \frac{1}{2M} \vec{\mathbf{P}}^2, & \mathbf{t}_{\text{rel}} &= \frac{1}{2\mu} \vec{\mathbf{q}}^2, \\ \mathbf{t}_r &= \frac{1}{2\mu} \mathbf{q}_r^\dagger \mathbf{q}_r, & \mathbf{t}_\Omega &= \frac{1}{2\mu} \frac{\vec{\mathbf{L}}^2}{\mathbf{r}^2}, \end{aligned} \quad (1.27)$$

wobei  $M = m_1 + m_2$  die Gesamtmasse und  $\mu = m_1 m_2 / M$  die reduzierte Masse bezeichnen. Durch Einsetzen der korrelierten Impulsoperatoren (1.21) lassen sich die korrelierten Formen der einzelnen Komponenten der kinetischen Energie darstellen. Nach einigen Umformungen folgt für den korrelierten Relativanteil

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{t}}_{\text{rel}} &= \mathbf{c}^\dagger \mathbf{t}_{\text{rel}} \mathbf{c} = \mathbf{t}_{\text{rel}} + \mathbf{q}_r^\dagger \frac{1}{2\tilde{\mu}_{r*}(\mathbf{r})} \mathbf{q}_r + \frac{1}{2\tilde{\mu}(\mathbf{r})} \frac{\vec{\mathbf{L}}^2}{\mathbf{r}^2} + \tilde{u}(\mathbf{r}) \\ &= \mathbf{t}_{\text{rel}} + \mathbf{q}_r^\dagger \frac{1}{2\tilde{\mu}_r(\mathbf{r})} \mathbf{q}_r + \vec{\mathbf{q}}^\dagger \frac{1}{2\tilde{\mu}(\mathbf{r})} \vec{\mathbf{q}} + \tilde{u}(\mathbf{r}).\end{aligned}\quad (1.28)$$

Neben dem unkorrelierten Relativanteil der kinetischen Energie treten auf der rechten Seite *abstandsabhängige effektive Massenkorrekturen* für die Radial- und die Winkelkomponente sowie ein zusätzliches *Zentralpotential* auf. Die zweite Zeile unterscheidet sich von der ersten lediglich bezüglich der Zerlegung der effektiven Massenkorrekturen, wobei die Form mit Radial- und Gradientenkomponente in der Anwendung meist günstiger ist. Die funktionale Form der Radialabhängigkeiten der drei Zusatzterme ist nur durch die Korrelationsfunktion  $R_+(r)$  und deren Ableitungen bestimmt. Für die effektiven Massenkorrekturen gilt

$$\begin{aligned}\frac{\mu}{\tilde{\mu}_{r*}(r)} &= \frac{1}{R_+^2(r)} - 1, & \frac{\mu}{\tilde{\mu}_r(r)} &= \frac{1}{R_+^2(r)} - \frac{r^2}{R_+^2(r)}, \\ \frac{\mu}{\tilde{\mu}(r)} &= \frac{r^2}{R_+^2(r)} - 1\end{aligned}\quad (1.29)$$

und für das zusätzliche Zentralpotential

$$\tilde{u}(r) = \frac{1}{2\mu} \frac{1}{R_+^2(r)} \left[ 2 \frac{R_+''(r)}{r R_+'(r)} - \frac{5}{4} \left( \frac{R_+''(r)}{R_+'(r)} \right)^2 + \frac{1}{2} \frac{R_+'''(r)}{R_+'(r)} \right]. \quad (1.30)$$

Der Schwerpunktsanteil  $\mathbf{t}_{\text{cm}}$  der kinetischen Energie ist invariant gegenüber Transformation mit dem Korrelator.

Damit ist der korrelierte Hamiltonoperator als analytisches Funktional der Korrelationsfunktion  $R_+(r)$  bestimmt

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{H}} &= \mathbf{T} + \mathbf{q}_r^\dagger \frac{1}{2\tilde{\mu}_r(\mathbf{r})} \mathbf{q}_r + \vec{\mathbf{q}}^\dagger \frac{1}{2\tilde{\mu}(\mathbf{r})} \vec{\mathbf{q}} + \tilde{u}(\mathbf{r}) + \tilde{v}(\mathbf{r}) \\ &= \mathbf{T} + \tilde{\mathbf{t}}_r + \tilde{\mathbf{t}}_\nabla + \tilde{u}(\mathbf{r}) + \tilde{v}(\mathbf{r}) = \mathbf{T} + \tilde{\mathbf{w}}.\end{aligned}\quad (1.31)$$

Im Vergleich zum unkorrelierten Hamiltonoperator treten zusätzliche Impulsabhängigkeiten in Form der effektiven Massenkorrekturen sowie ein modifiziertes Zentralpotential auf. Alle Terme außer der unkorrelierten kinetischen Energie lassen sich zu einer effektiven impulsabhängigen Zweiteilchenwechselwirkung  $\tilde{\mathbf{w}}$  zusammenfassen.

Die effektive Wechselwirkung  $\tilde{\mathbf{w}}$  besitzt zwei herausragende Eigenschaften:

- Für Korrelationsfunktionen endlicher Reichweite ist sie *streuphasenäquivalent* zum ursprünglichen Potential.
- Mit geeignet gewähltem  $R_+(r)$  kann die starke kurzreichweitige Abstoßung des ursprünglichen Potentials im lokalen Teil der effektiven Wechselwirkung vollkommen neutralisiert werden. An ihre Stelle treten die impulsabhängigen Terme.

Stark vereinfachend könnte man die Methode der unitären Korrelatoren in Anwendung auf das Zweiteilchensystem als Algorithmus zur Erzeugung einer ganzen Schar streuphasenäquivalenter Potentiale charakterisieren: Jede Korrelationsfunktion endlicher Reichweite generiert ein anderes streuphasenäquivalentes impulsabhängiges Potential. Aus dieser Schar kann die Wechselwirkung ausgewählt werden, die dem bei der Behandlung des Vielteilchenproblems berücksichtigten Modellraum angemessen ist.

## 1.3 Korrelator im Vielteilchenraum

Die Formulierung des unitären Korrelationsoperators im Vielteilchenraum in Analogie zum Zweiteilchensystem ist auf formalem Niveau trivial. Dagegen bedarf dessen Anwendung im Vielteilchenraum weiterer Näherungen, die durch ein systematisches Entwicklungsschema, die sog. Clusterentwicklung, generiert werden können. Die einfachste daraus resultierende Näherung ist die sog. Zweiteilchennäherung.

### 1.3.1 Unitärer Korrelationsoperator

Die formale Definition des unitären Korrelationsoperators läßt sich direkt auf den Vielteilchenraum übertragen. Der Korrelationsoperator  $\mathbf{C}$  im Vielteilchenraum ist als Exponential eines hermiteschen Generators  $\mathbf{G}$  definiert

$$\mathbf{C} = \exp(-i \mathbf{G}). \quad (1.32)$$

Der Generator kann zunächst ein allgemeiner Vielteilchenoperator sein, der sich in eine Summe aus irreduziblen Beiträgen zu Teilchenzahlen  $n \geq 2$  zerlegen läßt

$$\mathbf{G} = \mathbf{G}^{[2]} + \mathbf{G}^{[3]} + \mathbf{G}^{[4]} + \dots \quad \text{mit} \quad \mathbf{G}^{[k]} = \sum_{i_1 < \dots < i_k}^A \mathbf{g}^{[k]}(i_1 \dots i_k). \quad (1.33)$$

Der hochgestellte Index in eckigen Klammern bezeichnet die den Operator charakterisierende irreduzible Teilchenzahl. Ein Einteilchenanteil würde lediglich eine unitäre Drehung der Einteilchenzustände bewirken und spielt bei der Diskussion von Korrelationen keine Rolle. Der irreduzible Zweiteilchenanteil entspricht dem Generator  $\mathbf{g}$  im Zweiteilchenraum (1.8)

$$\mathbf{G}^{[2]} = \sum_{i < j}^A \mathbf{g}(ij). \quad (1.34)$$

Der irreduzible Dreiteilchenanteil  $\mathbf{G}^{[3]}$  wäre für die Beschreibung genuiner Dreiteilchenkorrelationen nötig, entsprechendes gilt für die Beiträge zu höheren Teilchenzahlen.

Vorerst beschränkt sich die Diskussion auf Generatoren, die allein durch einen irreduziblen Zweiteilchenanteil gebildet werden, d.h.  $\mathbf{G} = \mathbf{G}^{[2]}$ . Diese Einschränkung ist gerechtfertigt, solange die betrachteten Dichten hinreichend niedrig sind, um die Effekte genuiner Vielteilchenkorrelationen gegenüber den Zweiteilchenkorrelationen zu vernachlässigen. Um Verwirrungen vorzubeugen: genuine Dreiteilchenkorrelationen sind nicht mit der im folgenden diskutierten dritten Ordnung der Clusterentwicklung gleichzusetzen. Letztere entsteht durch die simultane Wirkung genuiner Zweiteilchenkorrelationen

zwischen allen Paaren eines Teilchentripels. Die genuinen Dreiteilchenkorrelationen beschreiben dagegen Korrelationen, die über diese verwobenen Zweiteilchenkorrelationen hinausgehen.

Formal lassen sich mit diesem Korrelationsoperator korrelierte Vielteilchenzustände (1.2) und korrelierte Operatoren im Vielteilchenraum (1.4) definieren. In Praxi ist die Struktur der korrelierten Vielteilchengrößen viel zu komplex, um sie — ähnlich elegant wie im Zweiteilchensystem — in einer geschlossen analytischen Form zu fassen. Man ist auf weitere Näherungen angewiesen, um das Problem im Vielteilchenraum handhabbar zu machen. Ein konsistentes Entwicklungsschema bietet die sog. Clusterentwicklung.

### 1.3.2 Clusterzerlegungsprinzip und Clusterentwicklung

Eine wichtige physikalische Eigenschaft eines Vielteilchensystems mit Wechselwirkungen endlicher Reichweite wird durch das *Clusterzerlegungsprinzip* beschrieben: Zwei lokalisierte Teilsysteme, sog. Cluster, eines Vielteilchensystems, deren Abstand wesentlich größer als die Reichweite der Wechselwirkung ist, sind unabhängig voneinander. Lediglich Wechselwirkungen eines Teilchens mit den Teilchen desselben Clusters beeinflussen dessen Zustand. Formal separiert der Zustand des Vielteilchensystem in ein direktes Produkt der Zustände der beiden Cluster

$$|\tilde{\Psi}, A\rangle \rightarrow |\tilde{\Psi}', n\rangle \otimes |\tilde{\Psi}'', A - n\rangle. \quad (1.35)$$

Das impliziert eine entsprechende Eigenschaft des unitären Korrelationsoperators im Vielteilchenraum: Wann immer ein System in nicht miteinander wechselwirkende Cluster aufgespalten werden kann, muß der Korrelationsoperator in ein direktes Produkt der Korrelationsoperatoren der Teilsysteme zerfallen. Unter dieser Voraussetzung gilt für den korrelierten Zustand

$$\mathbf{C}_A |\Psi, A\rangle \rightarrow \mathbf{C}_n |\Psi', n\rangle \otimes \mathbf{C}_{A-n} |\Psi'', A - n\rangle. \quad (1.36)$$

Um das zu gewährleisten, müssen die durch den Korrelationsoperator induzierten Korrelationen für Abstände jenseits der Wechselwirkungsreichweite „ausheilen“. Die irreduziblen Generatoren  $\mathbf{g}^{[k]}(i_1 \dots i_k)$  müssen verschwinden, sobald sich eines der Teilchen  $i_1 \dots i_k$  außerhalb der Wechselwirkungsreichweite befindet.

Aus diesem physikalischen Bild läßt sich ein konsistentes Entwicklungsschema, die sog. *Clusterentwicklung*, für korrelierte Operatoren im Vielteilchenraum ableiten. Die korrelierten Operatoren müssen, wie der Korrelationsoperator selbst, dem Clusterzerlegungsprinzip genügen. Es bietet sich also an, den korrelierten Operator  $\tilde{\mathbf{O}}$  in irreduzible Beiträge zu allen Teilchenzahlen bis zur Gesamtteilchenzahl  $A$  zu zerlegen

$$\tilde{\mathbf{O}}_A = \tilde{\mathbf{O}}_A^{[1]} + \tilde{\mathbf{O}}_A^{[2]} + \tilde{\mathbf{O}}_A^{[3]} + \dots + \tilde{\mathbf{O}}_A^{[A]}. \quad (1.37)$$

Die irreduziblen  $k$ -Teilchenoperatoren im  $A$ -Teilchenraum sind rekursiv definiert:

$$\tilde{\mathbf{O}}_A^{[k]} = \sum_{i_1 < \dots < i_k}^A \tilde{\mathbf{o}}^{[k]}(i_1 \dots i_k) \quad \text{mit} \quad \tilde{\mathbf{o}}^{[k]} = \tilde{\mathbf{O}}_k - \sum_{j=1}^{k-1} \tilde{\mathbf{O}}_k^{[j]}. \quad (1.38)$$

Für einen Einteilchenoperator wird der erste nichtverschwindende Term vom unkorrelierten Operator im Einteilchenraum gebildet  $\tilde{\mathbf{o}}^{[1]} = \mathbf{o}$ . Für einen  $n$ -Teilchenoperator

bildet der korrelierte Operator im  $n$ -Teilchenraum  $\tilde{\mathbf{o}}^{[n]} = \mathbf{C}_n^\dagger \mathbf{o} \mathbf{C}_n$  den ersten Summanden der Entwicklung.

Die Clusterentwicklung bietet einen natürlichen Ausgangspunkt für Näherungen der korrelierten Operatoren. Bei der Lösung des Vielteilchenproblems werden langreichweitige Komponenten der Wechselwirkung z.B. durch ein gemeinsames Mean-Field beschrieben. Nur die kurzreichweitigen Komponenten tragen zu den kurzreichweitigen Korrelationen bei, die mit Hilfe des unitären Korrelators behandelt werden. Ein herausgegriffenes Teilchen wird sich nie innerhalb der Korrelationsreichweite aller übrigen Teilchen befinden, vielmehr ist es nur mit relativ wenigen anderen Teilchen direkt korreliert. In diesem Sinne zerfällt das System in verschiedene Cluster, deren maximale Größe die höchste nichtverschwindende Ordnung der Clusterentwicklung festlegt. Alle Terme höherer Ordnung liefern aufgrund des Clusterzerlegungsprinzips keinen Beitrag. Damit ist es gerechtfertigt, die Clusterentwicklung in niedriger Ordnung abzuberechnen, sofern der mittlere Abstand der Teilchen hinreichend groß gegenüber der Reichweite der Korrelationen ist.

### 1.3.3 Hamiltonoperator in Zweiteilchennäherung

Die einfachste nichttriviale Näherung im Rahmen der Clusterentwicklung ist die sog. *Zweiteilchennäherung*, in der nur irreduzible Ein- und Zweiteilchenoperatoren berücksichtigt werden. Im Sinne des Clusterzerlegungsprinzips ist das gerechtfertigt, wenn sich maximal ein weiteres Teilchen innerhalb der Korrelationsreichweite eines beliebigen herausgegriffenen Teilchens befindet. Mit anderen Worten, das Korrelationsvolumen  $V_C$  (1.18) muß deutlich kleiner als die inverse Dichte des Systems sein. Das definiert einen Kleinheitsparameter  $\rho V_C \ll 1$ .

Der große Vorteil der Zweiteilchennäherung ist, daß korrelierte Operatoren im Vielteilchenraum in geschlossener Form darstellbar sind. Sie ergeben sich direkt aus den bereits hergeleiteten Ausdrücken im Zweiteilchensystem. Für einen Hamiltonoperator bestehend aus kinetischer Energie  $\mathbf{T}$  und Zweiteilchenwechselwirkung  $\mathbf{V}$  ergibt sich in Zweiteilchennäherung die Struktur

$$\tilde{\mathbf{H}}^{C2} = \tilde{\mathbf{T}}^{[1]} + \tilde{\mathbf{T}}^{[2]} + \tilde{\mathbf{V}}^{[2]} = \sum_i \tilde{\mathbf{t}}^{[1]}(i) + \sum_{i<j} \tilde{\mathbf{t}}^{[2]}(ij) + \sum_{i<j} \tilde{\mathbf{v}}^{[2]}(ij). \quad (1.39)$$

Die korrelierte kinetische Energie liefert einen Einteilchenbeitrag, der von der unkorrelierten kinetischen Energie gebildet wird, und einen Zweiteilchenbeitrag, der aus den effektiven Massenkorrekturen und dem zusätzlichen Zentralpotential besteht

$$\tilde{\mathbf{t}}^{[1]} = \mathbf{t}, \quad \tilde{\mathbf{t}}^{[2]} = \tilde{\mathbf{t}}_r + \tilde{\mathbf{t}}_\nabla + \tilde{u}(\mathbf{r}) = \tilde{\mathbf{t}}_{r*} + \tilde{\mathbf{t}}_\Omega + \tilde{u}(\mathbf{r}). \quad (1.40)$$

Die effektiven Massenkorrekturen zerlegt in Radial- und Gradientenbeitrag lauten entsprechend Gleichung (1.29) im einzelnen

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{t}}_r &= \mathbf{q}_r^\dagger \frac{1}{2\tilde{\mu}_r(\mathbf{r})} \mathbf{q}_r & \text{mit} & \quad \frac{\mu}{\tilde{\mu}_r(r)} = \frac{1}{R_+'^2(r)} - \frac{r^2}{R_+^2(r)}, \\ \tilde{\mathbf{t}}_\nabla &= \tilde{\mathbf{q}}^\dagger \frac{1}{2\tilde{\mu}(\mathbf{r})} \tilde{\mathbf{q}} & \text{mit} & \quad \frac{\mu}{\tilde{\mu}(r)} = \frac{r^2}{R_+^2(r)} - 1. \end{aligned} \quad (1.41)$$



Alternativ kann die Zerlegung in Radial- und Winkelanteil verwendet werden:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{t}}_{r*} &= \mathbf{q}_r^\dagger \frac{1}{2\tilde{\mu}_{r*}(\mathbf{r})} \mathbf{q}_r & \text{mit} & \quad \frac{\mu}{\tilde{\mu}_{r*}(r)} = \frac{1}{R_+^2(r)} - 1, \\ \tilde{\mathbf{t}}_\Omega &= \frac{\vec{\mathbf{L}}}{\mathbf{r}} \frac{1}{2\tilde{\mu}(\mathbf{r})} \frac{\vec{\mathbf{L}}}{\mathbf{r}} & \text{mit} & \quad \frac{\mu}{\tilde{\mu}(r)} = \frac{r^2}{R_+^2(r)} - 1.\end{aligned}\tag{1.42}$$

Der Potentialteil der korrelierten kinetischen Energie ist nach Gleichung (1.30) durch

$$\tilde{u}(r) = \frac{1}{2\mu} \frac{1}{R_+^2(r)} \left[ 2 \frac{R_+''(r)}{r R_+'(r)} - \frac{5}{4} \left( \frac{R_+''(r)}{R_+'(r)} \right)^2 + \frac{1}{2} \frac{R_+'''(r)}{R_+'(r)} \right]\tag{1.43}$$

gegeben. Das korrelierte Potential trägt lediglich mit einem Zweiteilchenterm bei:

$$\tilde{\mathbf{v}}^{[2]} = \tilde{v}(\mathbf{r}) = v[R_+(\mathbf{r})].\tag{1.44}$$

Alle Zweiteilchenterme lassen sich zu einer effektiven Zweiteilchenwechselwirkung  $\tilde{\mathbf{w}}^{[2]}$  zusammenfassen, die aus einem „gezähmten“ lokalen Potential  $\tilde{u}(r) + \tilde{v}(r)$  ohne starke kurzreichweitige Abstoßung und einer Impulsabhängigkeit mit abstandsabhängiger effektiver Masse besteht. Bei gegebener Korrelationsfunktion  $R_+(r)$  liegt diese effektive Wechselwirkung als geschlossener Ausdruck vor und kann leicht in einer Vielteilchenrechnung eingesetzt werden.

### 1.3.4 Jenseits der Zweiteilchennäherung

Wenn die Dichten der betrachteten Systeme im Vergleich zur Korrelationsreichweite zu groß werden, dann ist die Zweiteilchennäherung nicht mehr ausreichend und höhere Terme der Clusterentwicklung müssen berücksichtigt werden. Auch bei niedrigeren Dichten ist es hilfreich, die nächste Ordnung der Clusterentwicklung, d.h. die Dreiteilchenordnung, abzuschätzen, um die Qualität der Zweiteilchennäherung zu quantifizieren.

Aus der Clusterentwicklung ergibt sich für den korrelierten Hamiltonoperator in Dreiteilchennäherung, d.h. unter Berücksichtigung aller Terme bis zur Dreiteilchenordnung

$$\tilde{\mathbf{H}}^{C3} = \tilde{\mathbf{H}}^{C2} + \tilde{\mathbf{T}}^{[3]} + \tilde{\mathbf{V}}^{[3]} = \tilde{\mathbf{H}}^{C2} + \sum_{i<j<k} \tilde{\mathbf{t}}^{[3]}(ijk) + \sum_{i<j<k} \tilde{\mathbf{v}}^{[3]}(ijk).\tag{1.45}$$

Das Problem liegt in der Darstellung der Dreiteilchenbeiträge der korrelierten kinetischen Energie  $\tilde{\mathbf{t}}^{[3]}$  und des korrelierten Potentials  $\tilde{\mathbf{v}}^{[3]}$ . Sie sind durch

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{t}}^{[3]} &= \mathbf{C}_3^\dagger \left( \sum_i^3 \mathbf{t}(i) \right) \mathbf{C}_3 - \sum_{i<j}^3 \tilde{\mathbf{t}}^{[2]}(ij) - \sum_i^3 \mathbf{t}(i) \\ \tilde{\mathbf{v}}^{[3]} &= \mathbf{C}_3^\dagger \left( \sum_{i<j}^3 \mathbf{v}(ij) \right) \mathbf{C}_3 - \sum_{i<j}^3 \tilde{\mathbf{v}}^{[2]}(ij)\end{aligned}\tag{1.46}$$

definiert, wobei der jeweils erste Summand vom korrelierten Operator im Dreiteilchenraum gebildet wird. Diese Operatoren können (bisher) nicht in geschlossener Form angegeben werden, so daß zu ihrer Auswertung weitere Näherungen nötig sind. Der nächste Abschnitt diskutiert einen möglichen Näherungsansatz, die sog. Produktnäherung. In

Abschnitt 1.4 wird ein weiterer Zugang über normerhaltende Vielteilchenkoordinatentransformationen vorgestellt.

In vielen Fällen ist eine effektive Behandlung der Terme jenseits der Zweiteilchenordnung der viel aufwendigeren expliziten Berechnung der Dreiteilchenbeiträge vorzuziehen. Eine Möglichkeit besteht in der Verwendung dichteabhängiger Korrelationsfunktionen  $R_+(r, \rho)$  in Zweiteilchennäherung. Durch Einbeziehung der Gesamtdichte des Systems sind die Korrelationen in einem Teilchenpaar nicht mehr unabhängig vom Rest des Systems. Mit geeignet gewählter Dichteabhängigkeit lassen sich die Beiträge aller Ordnungen der Clusterentwicklung simulieren, ohne den technischen Aufwand bei der Berechnung korrelierter Größen wesentlich zu erhöhen. Die Konstruktion und Anwendung dichteabhängigen Korrelatoren wird unter anderem in Abschnitt 2.1.4 ausführlich diskutiert.

### 1.3.5 Produktnäherung des Vielteilchenkorrelators

In einem Dreiteilchensystem ist es nicht mehr unmittelbar möglich, den Korrelationsoperator formal mit einer normerhaltenden Koordinatentransformation zu verknüpfen, wie es für das Zweiteilchensystem gelungen ist. Da eine derartige Koordinatentransformation für die Anwendung aber überaus nützlich ist, soll dieser Zusammenhang wenigstens näherungsweise hergestellt werden.

Eine Möglichkeit zur näherungsweisen Beschreibung der Wirkung des Korrelators im Drei- und Mehrteilchenraum basiert auf einer Baker-Hausdorff-Entwicklung [Saku94] eines unitär transformierten Operators  $\tilde{\mathbf{O}}$  im Vielteilchenraum. Wie in [Roth97] gezeigt wurde, läßt sich eine analytische Partialsummation über eine große Klasse von Termen dieser Operatorentwicklung durchführen. Im Ergebnis läßt sich der Korrelator im Vielteilchenraum näherungsweise als sukzessive Anwendung von Zweiteilchenkorrelatoren zu allen Teilchenpaaren darstellen. Für einen korrelierten Operator im Dreiteilchensystem gilt im Rahmen dieser *Produktnäherung*

$$\mathbf{C}_3^\dagger \mathbf{O} \mathbf{C}_3 = \frac{1}{3!} \sum_{P(\alpha, \beta, \gamma)} \mathbf{c}^\dagger(\gamma) \mathbf{c}^\dagger(\beta) \mathbf{c}^\dagger(\alpha) \mathbf{O} \mathbf{c}(\alpha) \mathbf{c}(\beta) \mathbf{c}(\gamma). \quad (1.47)$$

Die Summe wird über alle Permutationen der Paarindizes  $\alpha = (12), \beta = (13)$  und  $\gamma = (23)$  gebildet. Anschaulich kann diese Form als Mittelung über alle möglichen Reihenfolgen der nichtkommutierenden Zweiteilchentransformationen bezüglich der verschiedenen Teilchenpaare verstanden werden. In diesem genäherten Bild ist  $\mathbf{C}_3$  nicht in der Form  $\exp(-i\mathbf{G}_3)$  darstellbar, nur die unitäre Abbildung eines Operators ist definiert. Die Unitarität ist daher auch nur im Sinne dieser Operatortransformation gegeben, d.h. der Einsoperator im Vielteilchenraum wird auf sich selbst abgebildet.

Mit Hilfe der Produktnäherung lassen sich die Erwartungswerte korrelierter Operatoren im Vielteilchenraum explizit berechnen. Für die korrelierte kinetische Energie im Dreiteilchenraum gilt

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \mathbf{C}_3^\dagger \mathbf{T}_3 \mathbf{C}_3 | \Psi \rangle &= \frac{1}{3!} \sum_{P(\alpha, \beta, \gamma)} \int d^3x_1 d^3x_2 d^3x_3 \\ &\times \frac{1}{2m} \sum_i^3 |\nabla_i \langle \vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3 | \mathbf{c}(\alpha) \mathbf{c}(\beta) \mathbf{c}(\gamma) | \Psi \rangle|^2 \end{aligned} \quad (1.48)$$

und entsprechend für ein korreliertes Zweiteilchenpotential

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \mathbf{C}_3^\dagger \mathbf{V}_3 \mathbf{C}_3 | \Psi \rangle &= \frac{1}{3!} \sum_{P(\alpha, \beta, \gamma)} \int d^3x_1 d^3x_2 d^3x_3 \\ &\times \sum_{i < j}^3 v(r_{ij}) |\langle \vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3 | \mathbf{c}(\alpha) \mathbf{c}(\beta) \mathbf{c}(\gamma) | \Psi \rangle|^2. \end{aligned} \quad (1.49)$$

Die neundimensionalen Integrationen sind numerisch mit Monte-Carlo-Verfahren handhabbar. Die Erweiterung der Produktnäherung auf beliebige Teilchenzahlen ist offensichtlich, allerdings wächst der numerische Aufwand für die hochdimensionalen Integrationen sehr stark.

## 1.4 Vielteilchenkorrelationen als Koordinatentransformation

Einer der großen Vorteile des unitären Korrelators im Zweiteilchensystem ist, daß der Korrelationsoperator analytisch mit einer normerhaltenden Koordinatentransformation identifiziert werden kann. Im Vielteilchenraum ist diese analytische Verbindung nicht mehr unmittelbar deduzierbar. Dennoch ist aufgrund des Konzeptes der unitären Korrelatoren klar, daß eine entsprechende Vielteilchen-Koordinatentransformation existieren muß. Daher ist es legitim, aus allgemeinen Eigenschaften des Korrelationsoperators eine genäherte Koordinatentransformation im Vielteilchenraum zu konstruieren. Dabei sind zwei Forderungen unabdingbar: Normerhaltung und Clusterzerlegungsprinzip.

### 1.4.1 Normerhaltende Koordinatentransformation

Sei ein System von  $n$  Teilchen mit den Koordinaten  $\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n$  betrachtet. Die Koordinaten der einzelnen Teilchen werden in Abhängigkeit von der Position aller anderen Teilchen transformiert, diese Transformation wird durch die Funktion  $\mathcal{X}_-$  beschrieben:

$$\vec{x}_i \rightarrow \vec{x}'_i = \vec{\mathcal{X}}_-(i; \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n) \quad \text{für } i = 1, \dots, n. \quad (1.50)$$

Die Nomenklatur im Argument der Transformationsfunktion soll andeuten, daß die  $i$ -te Koordinate in Abhängigkeit von allen anderen Koordinaten transformiert wird, d.h. der Wert der Funktion  $\vec{\mathcal{X}}_-$  ist der  $i$ -te transformierte Einteilchen-Koordinatenvektor. Eine kompaktere Form ergibt sich durch Einführung des  $3n$ -komponentigen Vielteilchen-Koordinatenvektors  $X = (\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n)^\top$ . Damit läßt sich die Transformation kompakt schreiben

$$X \xrightarrow{\mathcal{X}_-} X' = \mathcal{X}_-(X). \quad (1.51)$$

In dieser Schreibweise ist der Wert der Funktion  $\mathcal{X}_-$  ein transformierter  $3n$ -komponentiger Vielteilchen-Koordinatenvektor. Diese Koordinatentransformation soll auf eine allgemeine Vielteilchenwellenfunktion  $\langle X | \Psi \rangle$  angewendet werden. In Analogie zur Zweiteilchentransformation bedeutet das: Erstens, die Transformation des Arguments der Wellenfunktion nach (1.51) und zweitens die Multiplikation der transformierten Wellenfunktion  $\langle \mathcal{X}_-(X) | \Psi \rangle$  mit einem Metrikfaktor  $\mathcal{D}_-(X)$ :

$$\langle X | \Psi \rangle \xrightarrow{\mathcal{X}_-} \langle X | \tilde{\Psi} \rangle = \mathcal{D}_-(X) \langle \mathcal{X}_-(X) | \Psi \rangle. \quad (1.52)$$

Der Metrikfaktor gewährleistet die Erhaltung der Norm der transformierten Wellenfunktion. Der Zusammenhang mit der Transformationsfunktion selbst läßt sich aus dem Normintegral ableiten. Dessen Transformation auf die neue Koordinate  $X' = \mathcal{X}_-(X)$  ergibt:

$$\begin{aligned} \int d^{3n}X |\langle X | \Psi \rangle|^2 &\xrightarrow{\mathcal{X}_-} \int d^{3n}X' |\langle X' | \Psi \rangle|^2 = \int d^{3n}X \left\| \frac{\partial X'_i}{\partial X_j} \right\| |\langle X' | \Psi \rangle|^2 \\ &= \int d^{3n}X \left\| \frac{\partial [\mathcal{X}_-(X)]_i}{\partial X_j} \right\| |\langle \mathcal{X}_-(X) | \Psi \rangle|^2. \end{aligned} \quad (1.53)$$

Hier tritt bei Rückübertragung des transformierten Integrationsvolumens auf die alte Koordinate die Jacobideterminante der Transformation in Erscheinung, ihre Wurzel definiert den Metrikfaktor

$$\mathcal{D}_-(X) = \left\| \frac{\partial X'_i}{\partial X_j} \right\|^{1/2} = \left\| \frac{\partial [\mathcal{X}_-(X)]_i}{\partial X_j} \right\|^{1/2}, \quad (1.54)$$

wobei die Indizes  $i, j = 1, \dots, 3n$  über alle Komponenten des Vielteilchen-Koordinatenvektors laufen. Somit kann jede Koordinatentransformation, deren Jacobideterminante existiert, zur normerhaltenden Transformation der Vielteilchenwellenfunktion verwendet werden.

In Anlehnung an die Notation der Zweiteilchentransformation wird die inverse Transformation  $\mathcal{X}_+$  definiert

$$\mathcal{X}_+[\mathcal{X}_-(X)] = X. \quad (1.55)$$

Die Umkehrtransformation existiert, sofern die Jacobideterminante der Transformation überall von Null verschieden ist. Der Metrikfaktor der Umkehrtransformation  $\mathcal{X}_+$  ist gegeben durch

$$\mathcal{D}_+(X) = \left\| \frac{\partial [\mathcal{X}_+(X)]_i}{\partial X_j} \right\|^{1/2}. \quad (1.56)$$

Da beide Transformationen invers zueinander sind, gilt für die Jacobideterminanten und damit für die Metrikfaktoren folgende Relation:

$$\mathcal{D}_\pm(X) = \frac{1}{\mathcal{D}_\mp[\mathcal{X}_\pm(X)]}. \quad (1.57)$$

Formal läßt sich aus den Koordinatentransformationen  $\mathcal{X}_+$  bzw.  $\mathcal{X}_-$  ein äquivalenter unitärer Korrelationsoperator  $\mathbf{C}$  im Vielteilchenraum konstruieren. Allerdings ist dieser nicht in der Exponentialform des allgemeinen Ansatzes (1.32) für den Korrelationsoperator, sondern durch ein dyadisches Produkt dargestellt:

$$\mathbf{C} = \int d^{3n}X |X\rangle \mathcal{D}_-(X) \langle \mathcal{X}_-(X)| = \int d^{3n}X |\mathcal{X}_+(X)\rangle \mathcal{D}_+(X) \langle X|. \quad (1.58)$$

Die zweite Zeile ergibt sich durch Transformation der Integrationsvariablen. Der Korrelationsoperator kann also sowohl durch die Transformation  $\mathcal{X}_-$  als auch durch die Umkehrtransformation  $\mathcal{X}_+$  dargestellt werden. Die Anwendung der ersten Darstellung

auf einen unkorrelierten Zustand ergibt in Ortsdarstellung die gewünschte Form (1.52) des korrelierten Zustandes

$$\langle X | \mathbf{C} | \Psi \rangle = \mathcal{D}_-(X) \langle \mathcal{X}_-(X) | \Psi \rangle. \quad (1.59)$$

Für den hermitesch adjungierten Korrelationsoperator folgt unter Voraussetzung eines reellen Metrikfaktors direkt

$$\mathbf{C}^\dagger = \int d^{3n}X |X\rangle \mathcal{D}_+(X) \langle \mathcal{X}_+(X)| = \int d^{3n}X |\mathcal{X}_-(X)\rangle \mathcal{D}_-(X) \langle X|. \quad (1.60)$$

Für den mit dem adjungierten Korrelator transformierten Zustand gilt entsprechend

$$\langle X | \mathbf{C}^\dagger | \Psi \rangle = \mathcal{D}_+(X) \langle \mathcal{X}_+(X) | \Psi \rangle. \quad (1.61)$$

Durch Multiplikation des Korrelationsoperators mit dem adjungierten wird die Unitarität des Korrelationsoperators direkt bewiesen

$$\begin{aligned} \mathbf{C} \mathbf{C}^\dagger &= \iint d^{3n}X d^{3n}X' |\mathcal{X}_+(X)\rangle \mathcal{D}_+(X) \langle X|X'\rangle \mathcal{D}_+(X') \langle \mathcal{X}_+(X')| \\ &= \int d^{3n}X |\mathcal{X}_+(X)\rangle \mathcal{D}_+^2(X) \langle \mathcal{X}_+(X)| = \int d^{3n}X |X\rangle \langle X| = \mathbf{1}. \end{aligned} \quad (1.62)$$

Selbiges gilt für die umgekehrte Reihenfolge der Faktoren, so daß die Unitaritätsbedingung  $\mathbf{C} \mathbf{C}^\dagger = \mathbf{C}^\dagger \mathbf{C} = \mathbf{1}$  durch die Definition (1.58) erfüllt ist.

Zusammengefaßt: Zu einer beliebigen Vielteilchen-Koordinatentransformation mit positiver Jacobideterminante läßt sich formal ein unitärer Korrelationsoperator angeben. Für die Anwendung der Methode der unitären Korrelatoren ist eine weiterreichende Kenntnis des Korrelationsoperators nicht notwendig, da alle korrelierten Größen — Wellenfunktionen und Operatoren — allein durch die Koordinatentransformationen ausgedrückt werden können.

### 1.4.2 Korrelierte Operatoren

Auf Basis der allgemeinen Koordinatentransformation lassen sich Ausdrücke für korrelierte Operatoren ableiten. Von besonderem Interesse sind die Komponenten des Hamiltonoperators.

Für Operatoren  $V(\mathbf{X})$ , die als Funktion der Einteilchenkoordinaten aller Teilchen darstellbar sind, wie z.B. lokale Zwei- oder Dreiteilchenpotentiale, ist die korrelierte Form sehr einfach. Unter Verwendung der expliziten Darstellung der korrelierten Vielteilchenwellenfunktion ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle X | \mathbf{C}^\dagger V(\mathbf{X}) \mathbf{C} | \Psi \rangle &= \mathcal{D}_+(X) \langle \mathcal{X}_+(X) | V(\mathbf{X}) \mathbf{C} | \Psi \rangle \\ &= \mathcal{D}_+(X) V[\mathcal{X}_+(X)] \langle \mathcal{X}_+(X) | \mathbf{C} | \Psi \rangle \\ &= \mathcal{D}_+(X) V[\mathcal{X}_+(X)] \mathcal{D}_-[\mathcal{X}_+(X)] \langle \mathcal{X}_-[\mathcal{X}_+(X)] | \Psi \rangle \\ &= V[\mathcal{X}_+(X)] \langle X | \Psi \rangle \end{aligned} \quad (1.63)$$

Der korrelierte Operator ist also wie im Zweiteilchenfall einfach die unkorrelierte Funktion mit  $\mathcal{X}_+$ -transformiertem Argument

$$\mathbf{C}^\dagger V(\mathbf{X}) \mathbf{C} = V[\mathcal{X}_+(\mathbf{X})]. \quad (1.64)$$

Die Bestimmung der korrelierten kinetischen Energie ist um einiges komplexer. Zunächst wird der korrelierte Impulsoperator betrachtet. In Analogie zum Vielteilchen-Koordinatenvektor  $X$  wird der Vielteilchen-Impulsvektor  $P = (\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_n)^\top$  definiert. Seine korrelierte Form ergibt sich zu

$$\begin{aligned} \langle X | \mathbf{C}^\dagger \mathbf{P}_i \mathbf{C} | \Psi \rangle &= \mathcal{D}_+(X) \langle \mathcal{X}_+(X) | \mathbf{P}_i \mathbf{C} | \Psi \rangle \\ &= -i \mathcal{D}_+(X) \frac{\partial}{\partial [\mathcal{X}_+(X)]_i} \langle \mathcal{X}_+(X) | \mathbf{C} | \Psi \rangle \\ &= -i \mathcal{D}_+(X) \frac{\partial}{\partial [\mathcal{X}_+(X)]_i} \mathcal{D}_-[\mathcal{X}_+(X)] \langle X | \Psi \rangle. \end{aligned} \quad (1.65)$$

Zugunsten der Übersicht wird die letzte Gleichung mit Hilfe der transformierten Koordinate  $X' = \mathcal{X}_+(X)$  dargestellt

$$\begin{aligned} \langle X | \mathbf{C}^\dagger \mathbf{P}_i \mathbf{C} | \Psi \rangle &= -i \frac{1}{\mathcal{D}_-(X')} \frac{\partial}{\partial X'_i} \mathcal{D}_-(X') \langle X | \Psi \rangle \\ &= -i \left[ \frac{1}{\mathcal{D}_-(X')} \left( \frac{\partial}{\partial X'_i} \mathcal{D}_-(X') \right) + \frac{\partial}{\partial X'_i} \right] \langle X | \Psi \rangle. \end{aligned} \quad (1.66)$$

Die Ableitung nach der transformierten Koordinate läßt sich durch die Ableitung nach der ursprünglichen Koordinate ausdrücken

$$\frac{\partial}{\partial X'_i} = \frac{\partial}{\partial [\mathcal{X}_+(X)]_i} = \sum_j [J_-(X)]_{ij} \frac{\partial}{\partial X_j}, \quad (1.67)$$

dabei tritt die Jacobimatrix der Transformation  $\mathcal{X}_-(X)$  auf

$$[J_\pm(X)]_{ij} = \frac{\partial [\mathcal{X}_\pm(X)]_i}{\partial X_j}, \quad J_-(X) = J_+^{-1}(X). \quad (1.68)$$

Der korrelierte Operator des Impulsquadrats läßt sich direkt durch das Ergebnis für den korrelierten Impulsoperator (1.66) darstellen

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \mathbf{C}^\dagger \mathbf{P}_i^2 \mathbf{C} | \Psi \rangle &= \int d^{3n}X \langle \Psi | \mathbf{C}^\dagger \mathbf{P}_i \mathbf{C} | X \rangle \langle X | \mathbf{C}^\dagger \mathbf{P}_i \mathbf{C} | \Psi \rangle \\ &= \int d^{3n}X \langle \Psi | X \rangle \mathcal{D}_-(X') \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial X'_i} \frac{1}{\mathcal{D}_-^2(X')} \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial X'_i} \mathcal{D}_-(X') \langle X | \Psi \rangle \\ &= \int d^{3n}X' \langle \Psi | X \rangle \mathcal{D}_-(X') \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial X'_i} \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial X'_i} \mathcal{D}_-(X') \langle X | \Psi \rangle. \end{aligned} \quad (1.69)$$

Dabei wurde im letzten Schritt das Integral mittels  $d^{3n}X = \mathcal{D}_-^2(X') d^{3n}X'$  auf die transformierte Koordinate umgeschrieben. Auflösen dieses letzten Ausdruckes und partielle Integration eines Summanden liefert das Ergebnis

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \mathbf{C}^\dagger \mathbf{P}_i^2 \mathbf{C} | \Psi \rangle &= \int d^{3n}X' \langle \Psi | \mathcal{X}_-(X') \rangle \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial X'_i} \mathcal{D}_-^2(X') \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial X'_i} \langle \mathcal{X}_-(X') | \Psi \rangle \\ &\quad - \int d^{3n}X' \langle \Psi | \mathcal{X}_-(X') \rangle \left[ \mathcal{D}_-(X') \frac{\partial^2}{\partial X_i'^2} \mathcal{D}_-(X') \right] \langle \mathcal{X}_-(X') | \Psi \rangle. \end{aligned} \quad (1.70)$$

Die Rücktransformation der Integrationsvariablen ergibt

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \mathbf{C}^\dagger \mathbf{P}_i^2 \mathbf{C} | \Psi \rangle &= \int d^{3n}X \langle \Psi | X \rangle \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial X'_i} \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial X'_i} \langle X | \Psi \rangle \\ &\quad - \int d^{3n}X \langle \Psi | X \rangle \left[ \frac{1}{\mathcal{D}_-(X')} \frac{\partial^2}{\partial X'^2_i} \mathcal{D}_-(X') \right] \langle X | \Psi \rangle. \end{aligned} \quad (1.71)$$

Summation über den Index und Multiplikation mit dem Massenvorfaktor führt auf den Ausdruck für die korrelierten kinetische Energie. Rückübertragung in die Operator-schreibweise ergibt schließlich die Form

$$\mathbf{C}^\dagger \mathbf{T} \mathbf{C} = \sum_{j,k} \mathbf{P}_j [\widetilde{M}(\mathbf{X})]_{jk} \mathbf{P}_k + \widetilde{U}(\mathbf{X}). \quad (1.72)$$

Dabei ist  $\widetilde{M}(X)$  ein effektiver koordinatenabhängiger Massentensor definiert durch das Quadrat der Jacobimatrix

$$[\widetilde{M}(X)]_{jk} = \frac{1}{2m} \sum_i [J_-(X)]_{ji} [J_-(X)]_{ik} \quad (1.73)$$

und  $\widetilde{U}(X)$  ein lokales Potential gegeben durch

$$\widetilde{U}(X) = -\frac{1}{2m} \left[ \frac{1}{\mathcal{D}_-(X')} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial X'^2_i} \mathcal{D}_-(X') \right]_{X'=\mathcal{X}_+(X)}. \quad (1.74)$$

Wie im Zweiteilchenfall zeigt die korrelierte kinetische Energie zwei charakteristische Komponenten: Einen impulsabhängigen Teil mit einem koordinatenabhängigen effektiven Massentensor und ein lokales Potential. Sowohl der Massentensor als auch das Potential hängen nur von der gewählten Koordinatentransformation ab, die in diese Größen mittels der Jacobimatrix bzw. deren Determinante eingeht.

### 1.4.3 Eine mögliche Dreiteilchentransformation

Soweit gilt die Darstellung der Korrelationen durch normerhaltende Koordinatentransformationen ganz allgemein und für Systeme beliebiger Teilchenzahl. Vor der Anwendung muß das wesentliche physikalische Element dieser Formulierung, nämlich die konkrete Vielteilchen-Koordinatentransformation, spezifiziert werden. Dabei bildet das Clusterzerlegungsprinzip eine Richtschnur: Der Zustand eines wechselwirkenden Vielteilchensystems zerfällt in ein direktes Produkt der Zustände zweier Teilsysteme, sobald diese außerhalb der Reichweite gegenseitiger Wechselwirkungen liegen. Daraus ergibt sich eine Nebenbedingung an die Struktur der Koordinatentransformation: Man betrachte ein System aus  $n$  Teilchen, in dem das  $n$ -te Teilchen als separiert angenommen wird. Die Koordinatentransformation  $\vec{\mathcal{X}}_\pm^{(n)}$  im  $n$ -Teilchensystem muß entsprechend dem Clusterzerlegungsprinzip in unabhängige Koordinatentransformationen  $\vec{\mathcal{X}}_\pm^{(n-1)}$  für den verbleibenden Cluster und die untransformierte Koordinate  $\vec{x}_n$  für das separierte Teilchen zerfallen:

$$\begin{aligned} \vec{\mathcal{X}}_\pm^{(n)}(i; \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n) &\xrightarrow{x_n \rightarrow \infty} \vec{\mathcal{X}}_\pm^{(n-1)}(i; \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_{n-1}) \quad i \neq n \\ \vec{\mathcal{X}}_\pm^{(n)}(n; \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n) &\xrightarrow{x_n \rightarrow \infty} \vec{x}_n. \end{aligned} \quad (1.75)$$

Das Clusterzerlegungsprinzip beschreibt damit eine Konsistenzbedingung für die Koordinatentransformationen zu verschiedenen Teilchenzahlen.

Da sich jede Vielteilchenkoordinatentransformation durch Separation hinreichend vieler Teilchen auf eine Zweiteilchentransformation reduziert, stellt die bekannte Struktur der unitären Transformation im Zweiteilchensystem einen Grenzfall dar, der von jeder Vielteilchentransformation reproduziert werden muß. Wie man sich leicht überzeugt, läßt sich der unitäre Korrelator im Zweiteilchenraum äquivalent der in Abschnitt 1.2 diskutierten Form durch folgende Koordinatentransformationen beschreiben

$$\begin{aligned}\vec{\mathcal{X}}_{\pm}^{(2)}(1; \vec{x}_1, \vec{x}_2) &= \vec{x}_1 + \Delta_{\pm}(r_{12}) \vec{n}_{12} \\ \vec{\mathcal{X}}_{\pm}^{(2)}(2; \vec{x}_1, \vec{x}_2) &= \Delta_{\pm}(r_{21}) \vec{n}_{21} + \vec{x}_2\end{aligned}\quad (1.76)$$

Die Transformationen der beiden Einteilchenkoordinaten gehen durch zyklisches Vertauschen der Indizes ineinander über. Die Verschiebefunktion  $\Delta_{\pm}(r)$  ist direkt durch die Korrelationsfunktionen  $R_{\pm}(r)$  gegeben

$$\Delta_{\pm}(r) = \frac{1}{2}(R_{\pm}(r) - r). \quad (1.77)$$

Im Zweiteilchensystem spiegelt sich das Clusterzerlegungsprinzip darin wider, daß die Transformation für große Abstände in die identische Abbildung übergeht

$$\vec{\mathcal{X}}_{\pm}^{(2)}(1; \vec{x}_1, \vec{x}_2) \xrightarrow{x_2 \rightarrow \infty} \vec{x}_1. \quad (1.78)$$

Das ist dadurch gewährleistet, daß die Verschiebung  $\Delta_{\pm}(r)$  für große  $r$  gegen Null geht.

Nun ist ein einfacher Ansatz für eine Dreiteilchentransformation  $\vec{\mathcal{X}}_{+}^{(3)}$  gesucht, die mit der Zweiteilchentransformation (1.76) konsistent ist, d.h.

$$\vec{\mathcal{X}}_{+}^{(3)}(1; \vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3) \xrightarrow{x_3 \rightarrow \infty} \vec{\mathcal{X}}_{+}^{(2)}(1; \vec{x}_1, \vec{x}_2). \quad (1.79)$$

Eine dementsprechende Dreiteilchentransformation kann durch einfache Verallgemeinerung der Zweiteilchentransformation konstruiert werden. Die Koordinate  $\vec{x}_1$  wird wie im Zweiteilchenfall entsprechend dem Abstand zu  $\vec{x}_2$  entlang der Achse zwischen beiden Koordinaten verschoben und zusätzlich in gleicher Weise bezüglich der Koordinate  $\vec{x}_3$  transformiert. Entsprechendes gilt für die anderen Koordinaten

$$\begin{aligned}\vec{\mathcal{X}}_{+}^{(3)}(1; \vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3) &= \vec{x}_1 + \Delta_{+}(r_{12}) \vec{n}_{12} + \Delta_{+}(r_{13}) \vec{n}_{13} \\ \vec{\mathcal{X}}_{+}^{(3)}(2; \vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3) &= \Delta_{+}(r_{21}) \vec{n}_{21} + \vec{x}_2 + \Delta_{+}(r_{23}) \vec{n}_{23} \\ \vec{\mathcal{X}}_{+}^{(3)}(3; \vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3) &= \Delta_{+}(r_{31}) \vec{n}_{31} + \Delta_{+}(r_{32}) \vec{n}_{32} + \vec{x}_3\end{aligned}\quad (1.80)$$

Das Clusterzerlegungsprinzip ist hier offensichtlich erfüllt. Diese Transformation entspricht dem anschaulichen Konzept, das der Konstruktion des Korrelators zugrunde liegt: Ein Teilchen wird als Folge des repulsiven Cores der Wechselwirkung von einem anderen Teilchen radial weggeschoben. Die Zweiteilchenordnung berücksichtigt dabei nur die Wechselwirkung mit einem Nachbarteilchen, die Dreiteilchenordnung sieht die gleichzeitige Wechselwirkung mit zwei Nachbarteilchen vor. Offenbar läßt sich die obige Transformation direkt auf beliebige Teilchenzahlen verallgemeinern.

Ein Nachteil dieses Typs von Dreiteilchentransformation ist, daß die inverse Transformation  $\vec{\mathcal{X}}_{-}^{(3)}$  in der exakten Form nicht einfach angegeben werden kann. In den



anwendungsrelevanten Fällen läßt sich jedoch durch Einsetzen der inversen Verschiebefunktion  $\Delta_{-}(r)$  in den Ansatz (1.80) eine sehr gute Näherung konstruieren

$$\begin{aligned}\vec{\mathcal{X}}_{-}^{(3)}(1; \vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3) &\approx \vec{x}_1 + \Delta_{-}(r_{12}) \vec{n}_{12} + \Delta_{-}(r_{13}) \vec{n}_{13} \\ \vec{\mathcal{X}}_{-}^{(3)}(2; \vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3) &\approx \Delta_{-}(r_{21}) \vec{n}_{21} + \vec{x}_2 + \Delta_{-}(r_{23}) \vec{n}_{23} \cdot \\ \vec{\mathcal{X}}_{-}^{(3)}(3; \vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3) &\approx \Delta_{-}(r_{31}) \vec{n}_{31} + \Delta_{-}(r_{32}) \vec{n}_{32} + \vec{x}_3\end{aligned}\quad (1.81)$$

Bei Verwendung dieser Näherung zur Berechnung von Erwartungswerten korrelierter Operatoren ist darauf zu achten, daß numerische Hin- und Rücktransformationen vermieden werden. Zur Berechnung der korrelierten kinetischen Energie im Dreiteilchensystem sollte daher die Form (1.70) verwendet werden, für deren Auswertung nur die Transformation  $\vec{\mathcal{X}}_{-}^{(3)}$  benötigt wird.

#### 1.4.4 Koordinatentransformation vs. Produktnäherung

Mit der Produktnäherung entsprechend Abschnitt 1.3.5 und der hier geschilderten normerhaltenden Koordinatentransformation stehen zwei Methoden zur Verfügung, um die Dreiteilchenbeiträge der Clusterentwicklung näherungsweise zu bestimmen. Beide Näherungen sind aus unterschiedlichen Motiven entwickelt: Die erste basiert auf einer formalen Entwicklung korrelierter Operatoren, die zweite auf einer phänomenologisch konstruierten Koordinatentransformation. Es ist zu prüfen, welcher der beiden Ansätze aus physikalischer Sicht besser geeignet ist.

Als einfachstes Beispiel, das eine Gegenüberstellung beider Zugänge erlaubt, sei die Transformation eines Koordinatentripels (oder dreier klassischer Teilchen) betrachtet. Die Anwendung des Dreiteilchenkorrelators bedeutet eine Transformation der drei Koordinaten in Abhängigkeit von ihrer Ursprungsposition. Die Produktnäherung besteht dabei in der sukzessiven Anwendung der Zweiteilchentransformation für alle drei Koordinatenpaare und Mittelung über alle Reihenfolgen. Die verallgemeinerte Koordinatentransformation erfordert nur die Anwendung der Dreiteilchentransformation entsprechend (1.80). Als Zweiteilchenkorrelationsfunktion  $R_{+}(r)$  wird die eines Hardcorepotentials zugrundegelegt, d.h. alle Teilchenpaare mit Abständen kleiner dem Coreradius ( $r_{\text{core}} = 0.5\text{fm}$ ) werden auf Abstände größer dem Coreradius verschoben. Die konkrete Form des Korrelators entspricht dem optimalen globalen Korrelator für das Gammel-Christian-Thaler Potential, der in Abschnitt 4.1.1 diskutiert wird (siehe Abbildung 4.2).

Man betrachte exemplarisch das Verhalten der transformierten Abstände der drei Teilchen für den Fall, daß Teilchen 1 und 2 in der Ausgangsformation einen Abstand von  $r_{12} = 0.1 r_{\text{core}}$  aufweisen. Das dritte Teilchen kann auf der Mittelsenkrechten der beiden anderen in einem Abstand  $d$  zu deren Schwerpunkt positioniert werden. In Abbildung 1.1 sind die transformierten Abstände  $\tilde{r}_{12}$  bzw.  $\tilde{r}_{13} = \tilde{r}_{23}$  als Funktion der Entfernung  $d$  des dritten Teilchens aufgetragen. Wie zu erwarten schiebt der Korrelator in Zweiteilchennäherung die Teilchen 1 und 2 gerade aus dem Core heraus, das dritte Teilchen hat dabei keinen Einfluß. Die Dreiteilchenkorrelationen im Rahmen der verallgemeinerten Koordinatentransformation bewirken eine weitere Verschiebung der ersten beiden Teilchen, wenn das dritte Teilchen sehr nahe ist. Liegt das dritte Teilchen praktisch auf der Achse der beiden ersten, dann wird deren Abstand  $\tilde{r}_{12}$  gerade auf den doppelten Coreradius erhöht, der Abstand  $\tilde{r}_{13} = \tilde{r}_{23}$  des dritten Teilchens zu den

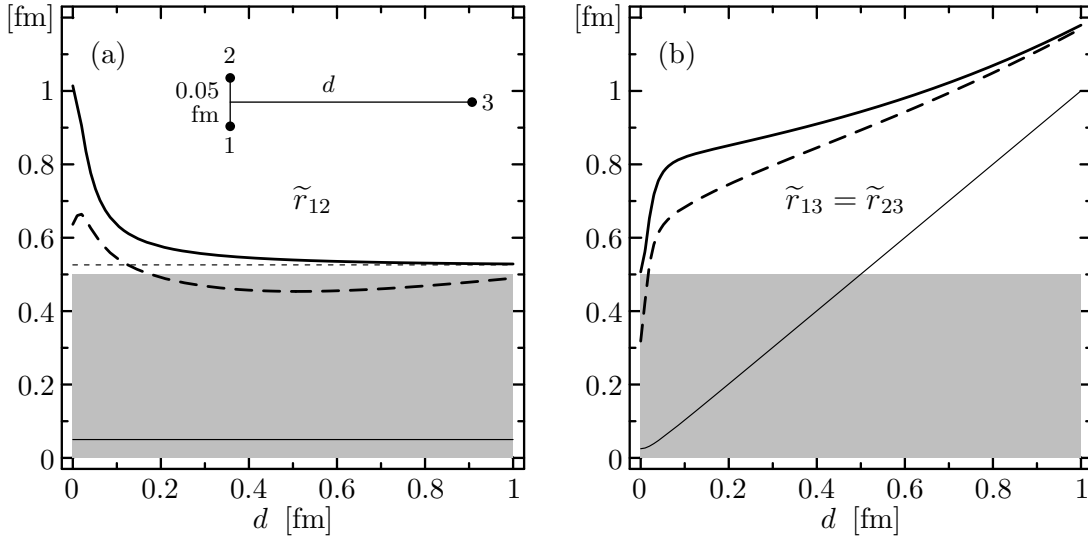


Abbildung 1.1 · Dreiteilchenkorrelierte Abstände in einem Teilchentripel beschrieben durch die verallgemeinerte Koordinatentransformation (—) und die Produktnäherung (---) als Funktion der Entfernung  $d$  des dritten Teilchens. Zum Vergleich sind die unkorrelierten Abstände (——) sowie das Ergebnis der Zweiteilchennäherung bezüglich der ersten beiden Teilchen (-----) eingezeichnet. Verwendet wird die Korrelationsfunktion eines Hard-Core-Potentials mit 0.5fm Coreradius (siehe Text).

beiden entspricht gerade dem Coreradius. Entfernt sich das dritte Teilchen, dann reduziert sich diese zusätzliche Verschiebung der beiden ersten Teilchen und der Abstand konvergiert gegen den Wert in Zweiteilchennäherung, der bei etwa  $d \sim 0.8$  fm erreicht wird.

Die Produktnäherung der Dreiteilchenkorrelationen zeigt dagegen ein pathologisches Verhalten: Durch den Einfluß des dritten Teilchens werden die ersten beiden in den gegenseitigen Core hineingeschoben. Ihr Abstand  $\tilde{r}_{12}$  verringert sich unter den Wert in Zweiteilchennäherung. Auch der Abstand  $\tilde{r}_{13} = \tilde{r}_{23}$  des dritten Teilchens zu den beiden übrigen ist bei kleinen  $d$  kleiner als der Coreradius. Berechnet man mit einer nach dieser Methode transformierten Wellenfunktion den Erwartungswert eines Hard-Core-Potentials, dann erhält man zwangsläufig divergente Beiträge. Für ein Soft-Core-Potential bewirkt die „Verschiebung in den Core“ eine unphysikalische Erhöhung des Potentialerwartungswertes. Diese Pathologie der Produktnäherung tritt zwar nur auf, wenn zwei Teilchen extrem nah beieinander liegen, sie zeigt aber dennoch, daß die Partialsummation der Operatorentwicklung wesentliche Terme vernachlässigt.

Zusammenfassend: Die verallgemeinerte Koordinatentransformation ist nicht nur der einfachere Weg, um die Effekte der Dreiteilchenkorrelationen zu beschreiben, sondern sie ist auch der Natur der Drei- und Mehrteilchenkorrelationen besser angepaßt.

## Kapitel 2

---

# Stark wechselwirkende Fermigase

Eines der physikalischen Systeme, das mit den Mitteln der Methode der unitären Korrelatoren untersucht werden soll, ist das homogene stark wechselwirkende Fermigas. Dieses Kapitel diskutiert die formalen Aspekte der Berechnung korrelierter Energien und korrelierter Orts- bzw. Impulsraumdichten. Das besondere Augenmerk richtet sich auf Neutronen- und Kernmaterie, der formale Apparat kann aber ebenso auf andere Systeme, z.B. flüssiges  $^3\text{He}$ , angewendet werden.

## 2.1 Zustandsgleichung

Die Observable, die für ein stark wechselwirkendes Fermigas von vorrangigem Interesse ist, ist der Erwartungswert der Energie pro Teilchen in Abhängigkeit von der Dichte des Systems bzw. dem Fermiimpuls. Der funktionale Zusammenhang  $\varepsilon(\rho)$  bzw.  $\varepsilon(k_F)$  ist eine mögliche Darstellung der *Zustandsgleichung* fermionischer Materie. In diesem Abschnitt soll die analytische Form der Zustandsgleichung im Rahmen der Methode der unitären Korrelatoren abgeleitet werden.

### 2.1.1 Hamiltonoperator und Zustände

Ziel ist es, den Erwartungswert der Energie in einem wechselwirkenden, entarteten Fermigas für ein gegebenes Potential zu berechnen. Dabei beschränkt man sich zunächst auf Terme bis zur zweiten Ordnung der Clusterentwicklung. Der korrelierte Hamiltonoperator in Zweiteilchennäherung ist entsprechend Abschnitt 1.3.3 von der Struktur

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{H}}^{C2} &= \mathbf{T} + \tilde{\mathbf{V}} + \tilde{\mathbf{U}} + \tilde{\mathbf{T}}_{\nabla} + \tilde{\mathbf{T}}_r \\ &= \sum_i \mathbf{t}(i) + \sum_{i<j} \tilde{\mathbf{v}}(ij) + \sum_{i<j} \tilde{\mathbf{u}}(ij) + \sum_{i<j} \tilde{\mathbf{t}}_{\nabla}(ij) + \sum_{i<j} \tilde{\mathbf{t}}_r(ij).\end{aligned}\tag{2.1}$$

Sowohl das Potential als auch der Korrelator können von Spin und Isospin abhängen. Die Spin-Isospinabhängigkeit des Potentials kann entweder durch Projektionsoperatoren  $\mathbf{\Pi}_{ST}$  auf Eigenzustände zum gekoppelten Spin und Isospin im Zweiteilchensystem oder durch die Produkte aus den Einteilchen-Spin- bzw. Isospinoperatoren

$\mathbf{O}^{p=1,\sigma,\tau,\sigma\tau} = \{1, \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2, \vec{\tau}_1 \vec{\tau}_2, (\vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2)(\vec{\tau}_1 \vec{\tau}_2)\}$  dargestellt werden:

$$\mathbf{v} = \sum_{S,T} v_{ST}(\mathbf{r}) \mathbf{\Pi}_{ST} = \sum_p v^p(\mathbf{r}) \mathbf{O}^p. \quad (2.2)$$

Die Transformationen des Operatoreils im Spin-Isospinraum bzw. der Radialabhängigkeiten des Potentials zwischen beiden Darstellungen lauten

$$\begin{pmatrix} \mathbf{\Pi}_{00} \\ \mathbf{\Pi}_{01} \\ \mathbf{\Pi}_{10} \\ \mathbf{\Pi}_{11} \end{pmatrix} = \mathbb{T} \begin{pmatrix} \mathbf{O}^1 \\ \mathbf{O}^\sigma \\ \mathbf{O}^\tau \\ \mathbf{O}^{\sigma\tau} \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad \begin{pmatrix} v_{00}(r) \\ v_{01}(r) \\ v_{10}(r) \\ v_{11}(r) \end{pmatrix} = (\mathbb{T}^{-1})^\top \begin{pmatrix} v^1(r) \\ v^\sigma(r) \\ v^\tau(r) \\ v^{\sigma\tau}(r) \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

mit den Transformationsmatrizen

$$\mathbb{T} = \frac{1}{16} \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 \\ 3 & -3 & 1 & -1 \\ 3 & 1 & -3 & -1 \\ 9 & 3 & 3 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbb{T}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ -3 & -3 & 1 & 1 \\ -3 & 1 & -3 & 1 \\ 9 & -3 & -3 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

Die Formulierung eines unitären spin-isospinabhängigen Korrelators erfordert die Darstellung in den Projektionsoperatoren  $\mathbf{\Pi}_{ST}$ . Da die Auswertung der Matrixelemente in der Formulierung mit den Operatoren  $\mathbf{O}^p$  jedoch einfacher ist, werden die Komponenten des korrelierten Hamiltonoperators zunächst in der Projektordarstellung bestimmt und anschließend in die  $\mathbf{O}^p$ -Darstellung transformiert.

Die Komponenten des korrelierten Hamiltonoperators sind im einzelnen: Die unkorrelierte kinetische Energie

$$\mathbf{t} = \frac{1}{2m} \mathbf{\vec{p}}^2, \quad (2.5)$$

das korrelierte spin-isospinabhängige Potential

$$\tilde{\mathbf{v}} = \sum_p \tilde{v}^p(\mathbf{r}) \mathbf{O}^p, \quad (2.6)$$

der Potentialteil der korrelierten kinetischen Energie

$$\tilde{\mathbf{u}} = \sum_p \tilde{u}^p(\mathbf{r}) \mathbf{O}^p, \quad (2.7)$$

der Gradiententeil der effektiven Massenkorrektur

$$\tilde{\mathbf{t}}_\nabla = \frac{1}{2\mu} \sum_p \mathbf{\vec{q}} \frac{\mu}{\tilde{\mu}^p(\mathbf{r})} \mathbf{\vec{q}} \mathbf{O}^p \quad (2.8)$$

und schließlich der Radialteil der effektiven Massenkorrektur

$$\tilde{\mathbf{t}}_r = \frac{1}{2\mu} \sum_p \mathbf{q}_r^\dagger \frac{\mu}{\tilde{\mu}_r^p(\mathbf{r})} \mathbf{q}_r \mathbf{O}^p. \quad (2.9)$$

Die Radialabhängigkeiten der korrelierten lokalen Potentiale  $\tilde{v}(r)$  und  $\tilde{u}(r)$  sowie der effektiven Massenkorrekturen  $\tilde{\mu}(r)$  und  $\tilde{\mu}_r(r)$  als Funktion der Korrelationsfunktion  $R_+(r)$  sind in Abschnitt 1.3.3 angegeben.

Der Berechnung des Erwartungswertes des Hamiltonoperators (2.1) für ein wechselwirkendes Fermigas liegt folgende Idee zugrunde: Man betrachte ein endliches kubisches

Volumen  $V = L^3$  mit periodischen Randbedingungen, in dem  $A$  Teilchen enthalten sind. Für dieses System werden die Observablen, wie Energie oder Dichten in Orts- und Impulsraum, berechnet. Abschließend wird der Grenzübergang  $V, A \rightarrow \infty$  bei konstanter Dichte  $\rho = A/V$ , der sog. Kontinuumslikes, ausgeführt. Physikalisch sinnvolle Größen hängen lediglich von der Dichte und nicht von Teilchenzahl oder Volumen ab.

Die Berechnung des Energieerwartungswertes erfolgt im Rahmen eines Hartree-Fock-Modells. Der Vielteilchenzustand ist durch eine Slaterdeterminante von Einteilchenzuständen gegeben, im Grundzustand sind die energetisch niedrigsten Einteilchenzustände besetzt. Die Einteilchenzustände sind Eigenzustände zu einem selbstkonsistenten mittleren Feld, das wegen der Translationsinvarianz über das Volumen konstant sein muß. Damit sind die Einteilchenzustände ebene Wellen, die periodischen Randbedingungen unterliegen. Mit anderen Worten: Der unkorrelierte Vielteilchenzustand ist durch das freie Fermigas definiert. Der Einfluß der Wechselwirkung auf den Vielteilchenzustand wird allein durch den Korrelationsoperator beschrieben.

Für ein entartetes Fermigas sind die Einteilchenzustände neben der Impulsquantenzahl  $\vec{k}_i$  noch durch eine diskrete intrinsische Quantenzahl  $m_i$  gekennzeichnet, die  $\lambda$  verschiedene Werte annehmen kann:

$$|i\rangle = |\vec{k}_i\rangle \otimes |m_i\rangle. \quad (2.10)$$

Für die kernphysikalisch interessanten Systeme Kernmaterie bzw. Neutronenmaterie steht  $m_i$  als kollektiver Index für die Spin-Isospinquantenzahlen  $m_i^s$  und  $m_i^t$ . Die Entartungsgrade  $\lambda$  sind in diesen Fällen:

$$\begin{aligned} \text{Neutronenmaterie:} \quad \lambda &= 2 \\ \text{Kernmaterie:} \quad \lambda &= 4 \end{aligned} \quad (2.11)$$

Der Ortsanteil der Einteilchenzustände ist, wie gesagt, durch eine ebene Welle mit Impuls  $\vec{k}_i$  gegeben, die auf das Volumen  $V$  normiert wird

$$\langle \vec{x} | \vec{k}_i \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i \vec{k}_i \vec{x}). \quad (2.12)$$

Die periodischen Randbedingungen erzwingen die Quantisierungsbedingung

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{L} \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix}, \quad n_{x,y,z} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.13)$$

Die Impulsquantenzahl des höchsten im Grundzustand besetzten Einteilchenzustandes definiert den Fermiimpuls  $k_F$ . Bei der Berechnung von Erwartungswerten wird statt der Summation bis zu einer gewissen Teilchenzahl über alle Zustände mit Impulsbeträgen kleiner dem Fermiimpuls  $k_F$  — der sog. Fermikugel — summiert. Der Kontinuumslikes  $A, V \rightarrow \infty$  läßt sich nutzen, um die Summationen über die diskreten Impulseigenzustände in eine Integration über eine kontinuierliche Impulsvariable umzuformen. Dabei ist das Volumen einer Impulsraumzelle zu beachten, es gilt die Ersetzung:

$$\sum_{\vec{k}_i} \dots \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k_F}^{\dots} d^3k \dots \quad (2.14)$$

Die Summation bzw. Integration verläuft dabei über alle Impulsvektoren  $\vec{k}$  mit Betrag kleiner oder gleich dem Fermiimpuls  $k_F$ . Damit läßt sich zum Beispiel der Erwartungswert der Teilchenzahl mit dem Fermiimpuls verknüpfen

$$A = \sum_{i=1}^A 1 = \sum_{m=1}^{\lambda} \sum_{\vec{k}_i}^{k_F} 1 = \lambda \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k_F}^{\vec{k}} d^3k = \lambda \frac{V}{6\pi^2} k_F^3. \quad (2.15)$$

Nach Division durch  $V$  ergibt sich die immer wieder benötigte Beziehung zwischen Fermiimpuls  $k_F$  und Dichte  $\rho = A/V$ :

$$\rho = \frac{\lambda}{6\pi^2} k_F^3. \quad (2.16)$$

### 2.1.2 Energie in Zweiteilchennäherung

Der Erwartungswert des korrelierten Hamiltonoperators in Zweiteilchennäherung (2.1) kann direkt berechnet werden. Der Erwartungswert der Energie pro Teilchen wird in eine dem korrelierten Hamiltonoperator analoge Struktur zerlegt. Die einzelnen Summanden bezeichnen die Erwartungswerte der entsprechenden Operatoren dividiert durch die Teilchenzahl

$$\hat{\varepsilon}^{C2} = t_0 + \tilde{v} + \tilde{u} + \tilde{t}_{\nabla} + \tilde{t}_r. \quad (2.17)$$

Die Terme werden nun im einzelnen angegeben, die Herleitungen der hier gezeigten Ausdrücke finden sich in Abschnitt A.1 des Anhangs.

Für den Beitrag der unkorrelierten kinetischen Energie pro Teilchen  $t_0$  ergibt sich der wohlbekannte Term

$$t_0 = \frac{3}{10m} k_F^2. \quad (2.18)$$

Alle übrigen Terme sind Erwartungswerte von Zweiteilchenoperatoren. Hier macht sich die Antisymmetrie des Vielteilchenzustandes bemerkbar. Es ist zweckmäßig, diese Erwartungswerte in einen sog. direkten (di) und einen Austauschterm (xc) zu zerlegen. Zum Beispiel für das korrelierte Potential

$$\tilde{v} = \tilde{v}|_{\text{di}} + \tilde{v}|_{\text{xc}} \quad (2.19)$$

mit

$$\tilde{v}|_{\text{di}} = \frac{1}{A} \sum_{i < j} \langle ij | \tilde{\mathbf{v}} | ij \rangle, \quad \tilde{v}|_{\text{xc}} = -\frac{1}{A} \sum_{i < j} \langle ij | \tilde{\mathbf{v}} | ji \rangle. \quad (2.20)$$

Diese Summen über Matrixelemente für den direkten und den Austauschterm sind für die verschiedenen Zweiteilchenoperatoren zu berechnen, die Details dieser Rechnung finden sich in Anhang A.1; an dieser Stelle werden nur die Resultate angegeben.

Für den Erwartungswert des lokalen Operators  $\tilde{\mathbf{v}}$  (analog für  $\tilde{\mathbf{u}}$ ) ergeben sich für den direkten und den Austauschterm folgende Ausdrücke:

$$\begin{aligned} \tilde{v}|_{\text{di}} &= \frac{\lambda}{12\pi^2} k_F^3 \int d^3r \tilde{v}(r) \\ \tilde{v}|_{\text{xc}} &= -\frac{1}{12\pi^2} k_F^3 \int d^3r \tilde{v}(r) l_1^2(k_F r), \end{aligned} \quad (2.21)$$

wobei  $k_F$  den Fermiimpuls und  $\lambda$  den Entartungsgrad (2.11) bezeichnet, desweiteren tritt im Austauschterm die bekannte Slaterfunktion

$$l_1(x) = 3 \frac{j_1(x)}{x} = 3 \frac{\sin(x) - x \cos(x)}{x^3} \quad (2.22)$$

auf. Darüber hinaus sind hier wie in den folgenden Rechnungen die sphärischen Besselfunktionen  $j_l(x)$  zu  $l = 0$  und  $l = 1$  relevant

$$j_0(x) = \frac{\sin(x)}{x}, \quad j_1(x) = \frac{\sin(x)}{x^2} - \frac{\cos(x)}{x}. \quad (2.23)$$

Für die Komponenten des Gradiententeils des effektiven Massenterms ergibt die entsprechende Rechnung:

$$\begin{aligned} \tilde{t}_\nabla|_{\text{di}} &= \frac{\lambda}{80\pi^2\mu} k_F^5 \int d^3r \frac{\mu}{\tilde{\mu}(r)} \\ \tilde{t}_\nabla|_{\text{xc}} &= -\frac{1}{80\pi^2\mu} k_F^5 \int d^3r \frac{\mu}{\tilde{\mu}(r)} l_2(k_F r), \end{aligned} \quad (2.24)$$

wobei die Hilfsfunktion  $l_2(x)$  durch

$$l_2(x) = 15 \left[ \frac{j_0^2(x)}{x^2} + \left( \frac{15}{x^4} - \frac{1}{x^2} \right) j_1^2(x) - \frac{8}{x^3} j_0(x) j_1(x) \right] \quad (2.25)$$

gegeben ist. Schließlich gilt für den Radialteil des effektiven Massenterms:

$$\begin{aligned} \tilde{t}_r|_{\text{di}} &= \frac{\lambda}{240\pi^2\mu} k_F^5 \int d^3r \frac{\mu}{\tilde{\mu}_r(r)} \\ \tilde{t}_r|_{\text{xc}} &= -\frac{1}{240\pi^2\mu} k_F^5 \int d^3r \frac{\mu}{\tilde{\mu}_r(r)} l_3(k_F r), \end{aligned} \quad (2.26)$$

mit

$$l_3(x) = 45 \left[ \frac{j_0^2(x)}{x^2} + \left( \frac{21}{x^4} - \frac{1}{x^2} \right) j_1^2(x) - \frac{10}{x^3} j_0(x) j_1(x) \right]. \quad (2.27)$$

Diese Resultate lassen sich leicht auf Potentiale und Korrelatoren mit Spin-Isospinabhängigkeit übertragen. Die Operatoren der korrelierten Potentiale und der effektiven Massenkorekturen sind für das spin-isospinabhängige Problem durch die Ausdrücke (2.6) bis (2.9) gegeben. Sie bestehen aus vier Summanden, die die Spin-Isospinoperatoren  $\mathbf{O}^p = \{1, \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2, \vec{\tau}_1 \vec{\tau}_2, (\vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2)(\vec{\tau}_1 \vec{\tau}_2)\}$  enthalten. Die Berechnung des Erwartungswertes ergibt für jeden Summanden zusätzlich zu den oben gezeigten Termen einen Faktor, der aus der Summation der Matrixelemente der Operatoren  $\mathbf{O}^p$  über die Spin-Isospinfreiheitsgrade resultiert. Für die direkten Terme bzw. die Austauschtermine ergeben sich die Faktoren  $O_{\text{di}}^p$  bzw.  $O_{\text{xc}}^p$  zu

$p$	1	$\sigma$	$\tau$	$\sigma\tau$
$O_{\text{di}}^p$	1	0	0	0
$O_{\text{xc}}^p$	1	3	3	9

(2.28)

Zur Behandlung des spin-isospinabhängigen Problems sind also die obigen Erwartungswerte nur für jeden Summanden separat zu berechnen und mit dem entsprechenden Faktor zu multiplizieren. Zum Beispiel gilt für das lokale spin-isospinabhängige Potential

$$\tilde{v}|_{\text{di}} = \sum_{p=1}^4 \tilde{v}^p|_{\text{di}}, \quad \tilde{v}|_{\text{xc}} = \sum_{p=1}^4 \tilde{v}^p|_{\text{xc}} \quad (2.29)$$

mit

$$\tilde{v}^p|_{\text{di}} = O_{\text{di}}^p \frac{\lambda}{12\pi^2} k_F^3 \int d^3r \tilde{v}^p(r) \quad (2.30)$$

$$\tilde{v}^p|_{\text{xc}} = -O_{\text{xc}}^p \frac{1}{12\pi^2} k_F^3 \int d^3r \tilde{v}^p(r) l_1^2(k_F r).$$

Es sei bemerkt, daß für die direkten Terme nur die spin-isospinunabhängige Komponente ( $p = 1$ ) des Potentials beiträgt. In den Austauschtermen tragen dagegen alle Komponenten bei und die Komponenten zu höheren  $p$  sind sogar deutlich stärker gewichtet.

Damit sind alle Terme der korrelierten Energie pro Teilchen in Zweiteilchennäherung als Funktion des Fermiimpulses bekannt. Die Gesamtenergie pro Teilchen kann wie die Erwartungswerte der Einzelbeiträge in den direkten und den Austauschterm zerlegt werden

$$\tilde{\varepsilon}^{\text{C2}}(k_F) = \tilde{\varepsilon}^{\text{C2}}(k_F)|_{\text{di}} + \tilde{\varepsilon}^{\text{C2}}(k_F)|_{\text{xc}}. \quad (2.31)$$

Für den direkten Term ergibt sich die einfache Struktur

$$\tilde{\varepsilon}^{\text{C2}}(k_F)|_{\text{di}} = C_2 k_F^2 + C_3 k_F^3 + C_5 k_F^5. \quad (2.32)$$

Die Koeffizienten enthalten dabei neben Vorfaktoren nur die Integrale über die korrelierten Radialabhängigkeiten von Potentialen und effektiven Massenkorrekturen. Der direkte Term ist also ein einfaches Polynom in  $k_F$ , in dem nur die Potenzen 2, 3 und 5 vorkommen. Der Summand zu  $k_F^2$  stammt von der unkorrelierten kinetischen Energie, der zu  $k_F^3$  von den lokalen Potentialen und der zu  $k_F^5$  von den effektiven Massenkorrekturen.

Der Austauschterm hat eine komplexere Gestalt, da die eingehenden Integrale nicht unabhängig vom Fermiimpuls sind, sondern sphärische Besselfunktionen mit Argumenten  $k_F r$  enthalten. Die Abhängigkeit der Austauschterme vom Fermiimpuls  $k_F$  sowie deren Vorzeichen ist von der funktionalen Gestalt der korrelierten Potentiale und der effektiven Massen abhängig. Im allgemeinen wachsen die Austauschterme mit geringerer Potenzen in  $k_F$  als die direkten Terme. Für ein reines  $1/r$ -Potential ist der Austauschterm zum Beispiel proportional zu  $k_F$  während der direkte Term mit  $k_F^3$  wächst. Es wird sich zeigen, daß die Austauschterme verglichen mit den entsprechenden direkten Termen einen Beitrag von lediglich 10–20% liefern, so daß die allgemeine Struktur der Zustandsgleichung von den direkten Termen bestimmt ist.

Bereits an dieser Stelle läßt sich eine wichtige Beobachtung machen: Das Verhalten bei großen Fermiimpulsen bzw. bei großen Dichten ist wesentlich vom Vorzeichen der Proportionalitätskonstante des  $k_F^5$ -Terms abhängig. Es wird sich zeigen, daß diese Konstante positiv ist, d.h. für große Fermiimpulse (Dichten) wächst die Energie an — man erhält zwangsläufig Sättigung. Dieser Punkt ist von größter Wichtigkeit und wird später im Detail diskutiert.



### 2.1.3 Dreiteilchenbeiträge zur Energie

A priori ist nicht klar, daß die bisher diskutierte Zweiteilchennäherung der Clusterentwicklung zur Beschreibung der Zustandsgleichung eines stark wechselwirkenden Fermigas — z.B. Kern- und Neutronenmaterie — ausreicht. Eine konsequente Beantwortung dieser Frage ist nur durch eine Berechnung oder wenigstens Abschätzung der Beiträge der nächsten Ordnung der Clusterentwicklung — der Dreiteilchenordnung — möglich. Der korrelierte Hamiltonoperator in Dreiteilchennäherung lautet formal

$$\tilde{\mathbf{H}}^{\text{C3}} = \tilde{\mathbf{H}}^{\text{C2}} + \tilde{\mathbf{H}}^{[3]} = \mathbf{T} + \tilde{\mathbf{H}}^{[2]} + \tilde{\mathbf{H}}^{[3]}, \quad (2.33)$$

der Zweiteilchenteil  $\tilde{\mathbf{H}}^{\text{C2}}$  entspricht Gleichung (2.1). Der Dreiteilchenbeitrag  $\tilde{\mathbf{H}}^{[3]}$  setzt sich aus einem Beitrag der kinetischen Energie und einem Beitrag des Potentials zusammen:

$$\tilde{\mathbf{H}}^{[3]} = \tilde{\mathbf{T}}^{[3]} + \tilde{\mathbf{V}}^{[3]} = \sum_{i<j<l} \tilde{\mathbf{t}}^{[3]}(ijl) + \sum_{i<j<l} \tilde{\mathbf{v}}^{[3]}(ijl). \quad (2.34)$$

Die analytische Form der irreduziblen Dreiteilchenoperatoren  $\tilde{\mathbf{t}}^{[3]}$  und  $\tilde{\mathbf{v}}^{[3]}$  ist sehr viel komplexer als im Zweiteilchenfall. Es ist nicht ohne weiteres möglich, sie direkt aus der Darstellung des allgemeinen Korrelationsoperators im Dreiteilchenraum abzuleiten. Vielmehr ist man auf Näherungen der Dreiteilchenkorrelationen angewiesen. Zwei mögliche Näherungen wurden in den Abschnitten 1.3.5 und 1.4.3 beschrieben: Zum einen die Produktnäherung, die durch Entwicklung und Partialsumimation des mit dem vollen Dreiteilchenkorrelator transformierten Operators gewonnen wird. Zum anderen die verallgemeinerte Dreiteilchen-Koordinatentransformation, die durch die anschauliche Deutung der Wirkung des Dreiteilchenkorrelators motiviert ist. Mit Hilfe dieser Näherungen kann die analytische Form der Dreiteilchenbeiträge des korrelierten Potentials  $\tilde{\mathbf{v}}^{[3]}$  und der korrelierten kinetischen Energie  $\tilde{\mathbf{t}}^{[3]}$ , die sich wie im Zweiteilchenfall aus einem lokalen Potential  $\tilde{\mathbf{u}}^{[3]}$  und einem effektiven Massenteil zusammensetzt, angegeben werden.

Es verbleibt die Aufgabe, die Erwartungswerte dieser Dreiteilchenoperatoren in Kernmaterie zu berechnen. Die Energie pro Teilchen in Dreiteilchennäherung setzt sich aus der Energie in Zweiteilchennäherung (2.17) und den Erwartungswerten der Dreiteilchenbeiträge der kinetischen Energie und des Potentials zusammen:

$$\tilde{\varepsilon}^{\text{C3}} = \tilde{\varepsilon}^{\text{C2}} + \tilde{t}^{[3]} + \tilde{v}^{[3]}. \quad (2.35)$$

Die Erwartungswerte der Dreiteilchenoperatoren werden in einen direkten Term (di), einen Term mit einfachem Austausch (xc) und einen mit doppeltem Austausch (xxc) zerlegt. Zum Beispiel für das Dreiteilchenpotential:

$$\tilde{v}^{[3]} = \tilde{v}^{[3]}|_{\text{di}} + \tilde{v}^{[3]}|_{\text{xc}} + \tilde{v}^{[3]}|_{\text{xxc}}, \quad (2.36)$$

mit

$$\begin{aligned} \tilde{v}^{[3]}|_{\text{di}} &= \frac{1}{A} \sum_{i<j<l} \langle ijl | \tilde{\mathbf{v}}^{[3]} | ijl \rangle \\ \tilde{v}^{[3]}|_{\text{xc}} &= -\frac{1}{A} \sum_{i<j<l} \langle ijl | \tilde{\mathbf{v}}^{[3]} | jil \rangle + \langle ijl | \tilde{\mathbf{v}}^{[3]} | ilj \rangle + \langle ijl | \tilde{\mathbf{v}}^{[3]} | lji \rangle \\ \tilde{v}^{[3]}|_{\text{xxc}} &= \frac{1}{A} \sum_{i<j<l} \langle ijl | \tilde{\mathbf{v}}^{[3]} | jli \rangle + \langle ijl | \tilde{\mathbf{v}}^{[3]} | lij \rangle. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Die Berechnung der auftretenden Dreiteilchenmatrixelemente folgt dem Schema der Zweiteilchenrechnung, für das lokale Dreiteilchenpotential  $\tilde{\mathbf{v}}^{[3]}$  (analog  $\tilde{\mathbf{u}}^{[3]}$ ) ergibt sich

$$\begin{aligned}\tilde{v}^{[3]}|_{\text{di}} &= \frac{\lambda^2}{216\pi^4} k_F^6 \iint d^3x_1 d^3x_2 \tilde{v}^{[3]}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, 0) \\ \tilde{v}^{[3]}|_{\text{xc}} &= -\frac{\lambda}{72\pi^4} k_F^6 \iint d^3x_1 d^3x_2 \tilde{v}^{[3]}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, 0) l_1^2(k_F r_{12}) \\ \tilde{v}^{[3]}|_{\text{xxc}} &= \frac{1}{108\pi^4} k_F^6 \iint d^3x_1 d^3x_2 \tilde{v}^{[3]}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, 0) \times \\ &\quad \times l_1(k_F x_1) l_1(k_F x_2) l_1(k_F r_{12}),\end{aligned}\tag{2.38}$$

dabei bezeichnet  $l_1(x)$  die Slaterfunktion (2.22) und  $r_{12} = |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|$ . Der direkte Term des Dreiteilchenpotentials ist proportional zu  $k_F^6$  und dominiert bei großen Fermiimpulsen gegenüber den effektiven Massentermen der Zweiteilchenordnung.

Dies läßt sich analog zum Vorgehen im Falle der Zweiteilchenterme auf spin-isospinabhängige Potentiale mit spin-isospinunabhängigen Korrelatoren übertragen. Das unkorrelierte Zweiteilchenpotential und das entsprechende Potential im Dreiteilchenraum ist von der Form

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_2 &= \sum_{p=1}^4 v^p(\mathbf{r}_{12}) \mathbf{O}^p \\ \mathbf{v}_3 &= \sum_{p=1}^4 v^p(\mathbf{r}_{12}) \mathbf{O}^p(12) + v^p(\mathbf{r}_{13}) \mathbf{O}^p(13) + v^p(\mathbf{r}_{23}) \mathbf{O}^p(23),\end{aligned}\tag{2.39}$$

dabei ist  $\mathbf{O}^p = \{1, \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2, \vec{\tau}_1 \vec{\tau}_2, (\vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2)(\vec{\tau}_1 \vec{\tau}_2)\}$ . Die Erwartungswerte der einzelnen Summanden sind von der Form (2.38) mit zusätzlichen Faktoren, die den Erwartungswerten der Operatorteile im Spin-Isospinraum Rechnung tragen. Diese Faktoren für den direkten Term  $O_{3\text{di}}^p$ , den einfachen Austauschterm  $O_{3\text{xc}}^p$  und den doppelten Austauschterm  $O_{3\text{xxc}}^p$  ergeben sich zu

$p$	1	$\sigma$	$\tau$	$\sigma\tau$
$O_{3\text{di}}^p$	1	0	0	0
$O_{3\text{xc}}^p$	1	1	1	3
$O_{3\text{xxc}}^p$	1	3	3	9

(2.40)

Die Erwartungswerte der einzelnen Potentialkomponenten sind schließlich nur noch zu summieren. Für spin-isospinabhängige Korrelatoren wird der Ausdruck komplizierter, da Produkte der Spin-Isospinoperatoren zu verschiedenen Teilchenpaaren auftreten. Da die Dreiteilchenordnung ohnehin nur als Korrektur verwendet wird, soll auf die Berechnung dieser Teile verzichtet werden. Zur Abschätzung der Dreiteilchenbeiträge bei Korrelatoren mit Spin-Isospinabhängigkeit kann näherungsweise ein mittlerer Korrelator verwendet werden.

Für den effektiven Massenterm des Dreiteilchenbeitrags der korrelierten kinetischen Energie ist die entsprechende Rechnung durchzuführen, darauf soll hier jedoch verzichtet werden. Bereits aus der formalen Gestalt dieses Beitrags läßt sich schließen, daß der

direkte Term proportional zu  $k_F^8$  ist. Im Sinne einer Entwicklung der Zustandsgleichung nach Potenzen des Fermiimpulses bedeutet seine Vernachlässigung einen Abbruch der Entwicklung nach der Ordnung  $k_F^6$ . Alle Terme bis zur Ordnung  $k_F^6$  sind konsistent berücksichtigt. Für die hier untersuchten Dichten wird sich diese Näherung als ausreichend erweisen.

Nichtsdestotrotz lassen sich damit interessante Erkenntnisse zur Struktur der Zustandsgleichung, d.h. deren Entwicklung in Potenzen des Fermiimpulses, gewinnen. Für den direkten Term der Energie in Dreiteilchennäherung gilt nach den obigen Ausführungen (vergl. (2.32)):

$$\tilde{\varepsilon}^{C3}(k_F)|_{\text{di}} = C_2 k_F^2 + C_3 k_F^3 + C_5 k_F^5 + C_6 k_F^6 + C_8 k_F^8. \quad (2.41)$$

Hieraus läßt sich bereits die allgemeine Struktur der Zustandsgleichung in beliebiger Ordnung der Clusterentwicklung ablesen. Die direkten Terme der  $n$ -Teilchenordnung enthalten einen  $k_F^{3n-3}$ -Term von den lokalen Potentialen und einen  $k_F^{3n-1}$ -Term von den impulsabhängigen Komponenten. In der Einteilchenordnung, in der keine Korrelationen und kein Potential auftreten, liefert lediglich die unkorrelierte kinetische Energie eine  $k_F^2$ -Abhängigkeit. In der Zweiteilchenordnung kommt eine  $k_F^3$ -Komponente von den Potentialen und ein  $k_F^5$ -Teil von den effektiven Massentermen hinzu. Die Dreiteilchenordnung liefert zusätzlich einen  $k_F^6$ - und einen  $k_F^8$ -Term. Die Vierteilchenordnung würde einen  $k_F^9$ - und einen  $k_F^{11}$ -Beitrag erzeugen, u.s.w. Diese Struktur der Zustandsgleichung ist eine Folge des Konzepts der unitären Korrelatoren und spezifisch für diese. Ihre Bedeutung wird im Vergleich zu anderen Methoden, insbesondere den Jastrow-Korrelationen in Abschnitt 4.1.3, deutlich werden.

#### 2.1.4 Dichteabhängige Korrelatoren in Zweiteilchennäherung

Es ist nicht in allen Anwendungsfällen möglich, die dritte Ordnung der Clusterentwicklung explizit zu berechnen. Oftmals ist der numerische Aufwand dafür unangemessen hoch. In solchen Fällen wäre es hilfreich, die Beiträge höherer Clusterordnungen als effektive Korrektur der Zweiteilchennäherung zu formulieren, ohne dabei die einfache Struktur der zweiteilchenkorrelierten Größen zu verlieren. Einige Hinweise auf eine mögliche effektive Beschreibung der Vierteilchenkorrelationen erhält man zum einen aus phänomenologischen Betrachtungen der Effekte der Dreiteilchenordnung und zum anderen aus der Struktur des Energieerwartungswertes in Materie in Abhängigkeit von der Dichte in den verschiedenen Clusternäherungen.

Die Zweiteilchennäherung im Zusammenspiel mit der Energieminimierung weist die generelle Eigenschaft auf, den Energieerwartungswert zu unterschätzen — d.h. die Zweiteilchennäherung liefert in gebundenen Systemen in der Regel zu starke Bindung. Die Dreiteilchenordnung trägt meist mit einer positiven Korrektur zur Energie bei — die Bindungsenergie wird reduziert. Dieser Effekt verstärkt sich mit wachsender Dichte, bis die dritte Ordnung nicht mehr als kleine Korrektur betrachtet werden kann, sondern dominant wird. Die Näherung, Teilchenpaare als unabhängig zu betrachten, ist in solchen Fällen nicht mehr gerechtfertigt. Der Effekt der „dritten Teilchen“, die die Korrelationen zwischen Paaren beeinflussen, wird wesentlich.

Die Auswirkung der „dritten Teilchen“ kann im Rahmen einer effektiven Beschreibung auf Zweiteilchenniveau durch dichteabhängige Zweiteilchenkorrelatoren beschrieben werden. Die Dichte  $\rho$  — oder der Fermiimpuls  $k_F$  — fungiert als globaler Parameter, der die Relevanz der höheren Ordnungen beschreibt, er liefert globale Information über

die „dritten Teilchen“. Um die Qualität der Zweiteilchennäherung bei wachsender Dichte zu wahren, ist es notwendig, die Stärke der Korrelationen, repräsentiert z.B. durch das Korrelationsvolumen

$$V_C = \int d^3r (\mathcal{R}_+(r) - 1)^2, \quad (2.42)$$

zu reduzieren. Der Kleinheitsparameter

$$\kappa = \rho V_C, \quad (2.43)$$

dessen Größe als grobes Maß für die Anwendbarkeit der Zweiteilchennäherung gilt, kann auf diese Weise klein gehalten werden. Von diesem phänomenologischen Standpunkt aus würde man also einen effektiven, zustandsabhängigen Zweiteilchenkorrelator definieren, dessen Stärke mit zunehmender Dichte bzw. zunehmendem Fermiimpuls abnimmt.

In welcher funktionalen Form die Dichte in die Korrelationsfunktion eingeht, ist zunächst offen. Als Beispiel sei die typische Parametrisierung der Korrelationsfunktion  $R_+(r)$  für Soft-Core-Potentiale betrachtet

$$R_+(r) = r + \alpha (r/\beta)^\eta H(r/\beta), \quad (2.44)$$

dabei ist  $H(r)$  eine Ausheilfunktion, die für große  $r$  gegen Null strebt. Maßgeblich für die Stärke des Korrelators sind die beiden Parameter  $\alpha$  und  $\beta$ .  $\alpha$  beschreibt im wesentlichen die maximale Verschiebung und  $\beta$  die Reichweite der Korrelationen, beide besitzen die Dimension einer Länge. Die einfachste Möglichkeit, eine Dichteabhängigkeit zu implementieren, ist, diese Parameter dichteabhängig zu skalieren, was einer Umskalierung der Radialkoordinate gleichkommt. Dies wird durch Multiplikation mit einer Funktion  $\xi(\rho)$  erreicht

$$R_+(r, \rho) = r + \alpha \xi(\rho) \left( \frac{r}{\beta \xi(\rho)} \right)^\eta H\left( \frac{r}{\beta \xi(\rho)} \right). \quad (2.45)$$

Erste Indizien für eine physikalisch motivierte Wahl der Skalierungsfunktion  $\xi(\rho)$  ergeben sich aus der Betrachtung der Dichteabhängigkeit des Kleinheitsparameters bzw. des Korrelationsvolumens. Allgemein sollte  $\xi$  für  $\rho = 0$  den Wert Eins annehmen, da für kleine Dichten die Zweiteilchennäherung gültig und die damit bestimmten Werte der Parameter  $\alpha$  und  $\beta$  optimal sind. Im Sinne der Gültigkeit der Zweiteilchennäherung sollte der Kleinheitsparameter als Produkt  $V_C(\rho) \rho$  bei wachsender Dichte nicht proportional der Dichte, wie beim dichteunabhängigen Korrelator, sondern deutlich schwächer wachsen oder gar konstant bleiben. Mit dem obigen Ansatz für die Korrelationsfunktion ergibt sich für das Korrelationsvolumen ein Ausdruck der Form

$$\begin{aligned} V_C(\rho) &= \int d^3r (\mathcal{R}_+[r/\xi(\rho)] - 1)^2 = \int d^3r (\mathcal{R}_+[r/\xi(\rho)] - 1)^2 \\ &= \xi^3(\rho) \int d^3r' (\mathcal{R}_+(r') - 1)^2 = \xi^3(\rho) V_C. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Hierbei wurde verwendet, daß sich die Skalierung der Korrelatorparameter in der Metrikfunktion direkt als eine Skalierung der Koordinate auffassen läßt. Das Korrelationsvolumen des dichteabhängigen Korrelators ist also proportional zur dritten Potenz der Skalierungsfunktion. Eine physikalisch sinnvolle Wahl der Skalierungsfunktion sollte also für  $\xi^3(\rho)$  einen führenden, proportional zur Dichte abfallenden Term enthalten.

Ein einfacher Ansatz für die Skalierungsfunktion, der diese Forderung erfüllt, ist

$$\xi(\rho) = 1 - (\gamma \rho)^{1/3}. \quad (2.47)$$

Man kann dies als Entwicklung einer komplexeren Dichte- bzw.  $k_F$ -Abhängigkeit in niedrigster Ordnung verstehen, die offenbar nur für Dichten  $\rho \ll 1/\gamma$  gültig ist. Der freie Parameter  $\gamma$  legt die Stärke der Dichteabhängigkeit fest und ist durch Anpassung an Resultate jenseits der Zweiteilchennäherung zu bestimmen. Dies wird bei der Anwendung in Abschnitt 3.2.2 noch im Detail diskutiert.

Diese Wahl der Skalierungsfunktion ist noch sehr willkürlich, aus ihr ergeben sich jedoch einige Eigenschaften, die diesen Ansatz untermauern. Dazu sei die Struktur der Zustandsgleichung, speziell des korrelierten Potentialerwartungswertes in Zweiteilchennäherung, betrachtet. Durch Einsetzen des dichteabhängigen Korrelators wird das korrelierte Potential selbst dichteabhängig und der direkte Term erhält folgende Struktur:

$$\tilde{v}|_{\text{di}} = \frac{\rho}{2} \int d^3r v[R_+(r, \rho)] = \frac{\rho}{2} \xi^3(\rho) \int d^3\bar{r} v[\xi(\rho)R_+(\bar{r})]. \quad (2.48)$$

Dabei wurde ausgenutzt, daß sich durch den speziellen Ansatz der dichteabhängigen Korrelationsfunktion (2.45) die Skalierungsfunktion von den Korrelatorparametern auf die Koordinate  $r$  übertragen läßt. Einführung einer skalierten Koordinate  $\bar{r} = r/\xi(\rho)$  und Transformation des Integrals auf die Koordinate führt schließlich auf den letzten Term. Dieser Ausdruck kann nach Einsetzen der speziellen Wahl (2.47) der Skalierungsfunktion in einer Taylorreihe in der Dichte bzw. dem Stärkeparameter  $\gamma$  um Null entwickelt werden:

$$\tilde{v}|_{\text{di}} = \frac{\rho}{2} \sum_{n=0}^{\infty} (\gamma \rho)^{n/3} \int d^3r f_n(r). \quad (2.49)$$

Die Koeffizienten  $f_n(r)$  sind von dem Potential und der dichteunabhängigen Korrelationsfunktion bestimmt. Für die ersten drei Ordnungen gilt

$$\begin{aligned} f_0(r) &= v[R_+(r)] \\ f_1(r) &= -3v[R_+(r)] - R_+(r)v'[R_+(r)] \\ f_2(r) &= 3v[R_+(r)] + 3R_+(r)v'[R_+(r)] + \frac{1}{2}R_+^2(r)v''[R_+(r)]. \end{aligned} \quad (2.50)$$

Der Term nullter Ordnung ist gerade der mit dem ursprünglichen dichteunabhängigen Korrelator transformierte Erwartungswert, der proportional zur Dichte ist. Darüber hinaus treten alle Potenzen von  $\rho^{1/3}$  bzw.  $k_F$  auf, also insbesondere auch solche, die jenseits der Zweiteilchennäherung mit dichteunabhängigem Korrelator liegen. Damit simuliert die Dichteabhängigkeit auch Terme, die nur in den höheren Ordnungen der Clusterentwicklung vorkommen — z.B. den direkten Term der Dreiteilchenordnung mit seiner  $k_F^6$ -Abhängigkeit. Auch die Austauschsterme der höheren Ordnungen werden durch die gebrochenen Potenzen der Dichte in gewisser Weise berücksichtigt.

Die Zustandsgleichung in Zweiteilchennäherung mit dichteabhängigem Korrelator bildet bezüglich der Polynomialstruktur die volle Zustandsgleichung in beliebiger Ordnung der Clusterentwicklung nach und geht damit deutlich über die konventionelle Zweiteilchennäherung hinaus. Wie gut dieser Ansatz in Praxi funktioniert und ob die angenommene Skalierungsfunktion wirklich geeignet ist, wird in Abschnitt 3.2.2 diskutiert.

### 2.1.5 Dreiteilchen-Kontaktwechselwirkung

Neben der effektiven Beschreibung der Effekte höherer Ordnungen der Clusterentwicklung durch dichteabhängige Operatoren kann auch ein direkterer Weg beschritten werden. Die Beiträge der Dreiteilchenordnung können durch eine effektive Dreiteilchen-Kontaktwechselwirkung parametrisiert werden

$$v_\delta(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3) = \Gamma \delta(r_{12})\delta(r_{13})\delta(r_{23}). \quad (2.51)$$

$\Gamma$  ist ein freier Parameter — analog zu  $\gamma$  bei den dichteabhängigen Korrelatoren — der an weiterführende Rechnungen oder Näherungen jenseits der Zweiteilchennäherung angepaßt werden muß. Im Gegensatz zu den dichteabhängigen Korrelatoren geht der Ansatz über die Zweiteilchenordnung hinaus, da eine Dreiteilchenwechselwirkung explizit eingeführt wird. Trotzdem bleibt die analytische Einfachheit der Zweiteilchennäherung bestehen, da die Berechnung der Matrixelemente der Dreiteilchen-Kontaktwechselwirkung trivial ist.

Setzt man diese Wechselwirkung in die Ausdrücke (2.38) für die Matrixelemente eines lokalen Dreiteilchenpotentials ein, so eliminieren die Deltafunktionen alle Integrationen, und es ergeben sich die einfachen Formen

$$v_\delta|_{\text{di}} = \frac{\lambda^2}{216\pi^4} \Gamma k_F^6, \quad v_\delta|_{\text{xc}} = -\frac{\lambda}{72\pi^4} \Gamma k_F^6, \quad v_\delta|_{\text{xxc}} = \frac{1}{108\pi^4} \Gamma k_F^6. \quad (2.52)$$

Für den Erwartungswert gilt zusammengekommen

$$v_\delta = v_\delta|_{\text{di}} + v_\delta|_{\text{xc}} + v_\delta|_{\text{xxc}} = \frac{\Gamma}{36\pi^4} \left( \frac{1}{6} - \frac{\lambda}{2} + \frac{\lambda^2}{3} \right) k_F^6. \quad (2.53)$$

Die Dreiteilchen-Kontaktwechselwirkung geht in den Energieerwartungswert also nur über einen  $k_F^6$ -proportionalen Term ein. Das entspricht gerade der Abhängigkeit der führenden Ordnungen der lokalen Komponenten der dritten Clusterordnung.

Daraus ergibt sich unmittelbar eine Methode zur Fixierung des Stärkeparameters der Kontaktwechselwirkung. Wenn die direkten Terme der lokalen Beiträge der Dreiteilchenordnung die dominante Korrektur zur Zweiteilchennäherung sind, dann läßt sich der direkte Term des Erwartungswertes des lokalen Dreiteilchenpotentials  $\tilde{v}^{[3]}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3)$  (sowohl korreliertes Potential als auch lokaler Beitrag der korrelierten kinetischen Energie) mit dem Erwartungswert der Kontaktwechselwirkung identifizieren. Es ergibt sich der folgende Zusammenhang zwischen dem Stärkeparameter  $\Gamma$  und dem Integral über das Dreiteilchenpotential:

$$\Gamma = \frac{\lambda}{1 - 3\lambda + 2\lambda^2} \iint d^3x_1 d^3x_2 \tilde{v}^{[3]}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, 0). \quad (2.54)$$

Die Kontaktwechselwirkung ist in diesem Zusammenhang nichts weiter als eine Umformulierung des direkten Terms des Materieerwartungswertes eines lokalen Dreiteilchenpotentials. Der Vorteil ist aber, daß diese effektive Wechselwirkung auch in anderen Systemen, z.B. endlichen Kernen, einfach ausgewertet werden kann, um eine Abschätzung der nächsten Ordnung der Clusterentwicklung zu erhalten.

Hier liegt ein wesentlicher Vorteil der Formulierung einer effektiven Korrektur der Zweiteilchennäherung als Dreiteilchen-Kontaktwechselwirkung gegenüber den dichteabhängigen Korrelatoren: Sie ist direkt auf endliche Systeme übertragbar. Um einen

dichteabhängigen Korrelator in einem endlichen System, z.B. den vier gebundenen Nukleonen des  $\alpha$ -Teilchens, anzuwenden, ist die Definition einer „Dichte“ in diesem System erforderlich. Für die unendlich ausgedehnte Materie ist eine wohldefinierte Dichte  $\rho$  als äußerer Parameter gegeben. Eine derartige globale Dichte steht in endlichen Systemen nicht zur Verfügung; man ist gezwungen, einen Dichteparameter zu definieren, z.B. die maximale Einteilchendichte oder die Dichte für ein konstantes Dichteprofil mit gleichem rms-Radius. In letzter Konsequenz wäre sogar eine lokale Dichte zu definieren. In jedem Fall ist ein solcher Dichteparameter nicht äquivalent dem Dichtebegriff in Materie, so daß der für Materie bestimmte dichteabhängige Korrelator nicht ohne weiteres übertragbar ist. Anders für die effektive Dreiteilchen-Kontaktwechselwirkung: Hier sind die Korrekturen zur Zweiteilchennäherung einfach als zusätzlicher Wechselwirkungsterm im Hamiltonoperator parametrisiert, der für jedes beliebige System in gleicher Weise ausgewertet werden kann. Die aus den Untersuchungen unendlich ausgedehnter Materie abgeleiteten Korrekturen lassen sich also ohne weiteres auch auf endliche Systeme anwenden.

Dem steht allerdings auch ein wesentlicher Nachteil gegenüber. Die Kontaktwechselwirkung ist als spezielle Korrektur zum korrelierten Hamiltonoperator konstruiert. Es ist nicht möglich, damit eine konsistente Korrektur für andere Observablen, wie z.B. Radien oder Dichten, anzugeben. Hierin besteht der Vorteil der dichteabhängigen Korrelatoren: Da die effektive Korrektur direkt in die Korrelationsfunktion eingeht, kann sie konsistent für alle korrelierten Größen verwendet werden. So ist es z.B. denkbar, die Dichteabhängigkeit mit Hilfe der Energieerwartungswerte zu fixieren und dann zur Bestimmung von korrelierten Dichten zu verwenden. Da die konzeptionelle Grundlage der dichteabhängigen Korrelatoren nicht speziell an die Energieerwartungswerte gekoppelt ist, kann davon ausgegangen werden, daß sie auch bei anderen Observablen eine effektive Beschreibung der höheren Ordnungen der Clusterentwicklung liefert.

## 2.2 Orts- und Impulsraumdichten

Neben der Zustandsgleichung sind auch Dichteverteilungen relevante Observablen für das wechselwirkende Fermigas. Von besonderem Interesse sind die Diagonalelemente der Zweiteilchendichte in Ortsdarstellung sowie die Impulsraum-Besetzungszahlen.

### 2.2.1 Einteilchendichtematrix

Zunächst wird die formale Definition von Dichteoperatoren und Dichtematrizen diskutiert. Die Einteilchendichtematrix in der Darstellung durch eine beliebige vollständige Einteilchenbasis  $\{|\alpha\rangle\}$  ist durch

$$\rho^{(1)}(\alpha_1; \alpha_2) := \langle \mathbf{a}^\dagger(\alpha_2) \mathbf{a}(\alpha_1) \rangle \quad (2.55)$$

definiert. Dabei ist  $\mathbf{a}^\dagger(\alpha)$  bzw.  $\mathbf{a}(\alpha)$  der Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperator für ein Teilchen im Zustand  $|\alpha\rangle$  und der Erwartungswert ist mit dem Zustand des Vielteilchensystems zu berechnen. Darauf aufbauend läßt sich der Einteilchendichteoperator formulieren:

$$\rho^{(1)} = \sum_{\alpha_1, \alpha_2} |\alpha_1\rangle \rho^{(1)}(\alpha_1; \alpha_2) \langle \alpha_2|. \quad (2.56)$$

Durch Darstellung in der Eigenbasis  $\{|\eta\rangle\}$  des Einteilchendichteoperators gelangt man zu seiner Spektraldarstellung:

$$\rho^{(1)} = \sum_{\eta} |\eta\rangle n(\eta) \langle\eta|. \quad (2.57)$$

Die Dichtematrix ist in dieser Darstellung diagonal und enthält die Besetzungszahlen  $n(\eta)$  der jeweiligen Einteilchenzustände, die in einem fermionischen System Werte zwischen 0 und 1 annehmen können.

Diese allgemeine Form läßt sich für ein homogenes Fermigas konkretisieren. Der Vielteilchenzustand wird durch eine Slaterdeterminante von Einteilchenzuständen (2.12)

$$|i\rangle = |\vec{k}_i, m_i\rangle, \quad i = 1, \dots, A \quad (2.58)$$

mit Impulsen  $\vec{k}_i$  bis zum Fermiimpuls  $k_F$  und Spin-Isospinquantenzahlen  $m_i = 1, \dots, \lambda$  beschrieben. Die Dichtematrix ist in der Darstellung durch diese Einteilchenzustände diagonal, und die Besetzungszahlen nehmen unterhalb des Fermiimpulses den Wert 1, oberhalb den Wert 0 an. Der Einteilchendichteoperator lautet explizit

$$\rho^{(1)} = \sum_i^A |i\rangle\langle i| = \sum_i^A |\vec{k}_i, m_i\rangle\langle\vec{k}_i, m_i| = \sum_m^\lambda \sum_{\vec{k}}^{k_F} |\vec{k}, m\rangle\langle\vec{k}, m|. \quad (2.59)$$

Unter Verwendung der Ortsdarstellung der Impulseigenzustände (2.12) läßt sich daraus die Dichtematrix in Ortsdarstellung ableiten

$$\begin{aligned} \rho^{(1)}(\vec{x}_1, m_1; \vec{x}_2, m_2) &= \langle\vec{x}_1, m_1| \rho^{(1)} |\vec{x}_2, m_2\rangle \\ &= 3\rho \frac{j_1(k_F r_{12})}{k_F r_{12}} \frac{1}{\lambda} \delta_{m_1 m_2} = \rho^{(1)}(r_{12}) \frac{1}{\lambda} \delta_{m_1 m_2}, \end{aligned} \quad (2.60)$$

wobei  $r_{12} = |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|$ . Aus der Isotropie und der Translationsinvarianz des Fermigases ergibt sich unmittelbar, daß die Matrixelemente der Einteilchendichte nur von diesem Betrag der Differenz der beiden Vektoren abhängen können. Die Spur über die Spin-Isospinquantenzahlen ergibt den Ortsanteil der Einteilchendichtematrix

$$\begin{aligned} \rho^{(1)}(r_{12}) &= \sum_m^\lambda \rho^{(1)}(\vec{x}_1, m; \vec{x}_2, m) \\ &= 3\rho \frac{j_1(k_F r_{12})}{k_F r_{12}} = \rho l_1(k_F r_{12}) \end{aligned} \quad (2.61)$$

mit der in (2.22) definierten Slaterfunktion  $l_1(x)$ . Für das Diagonalelement der Einteilchendichte, d.h. für  $\vec{x}_1 = \vec{x}_2$ , ergibt der Grenzübergang  $r_{12} \rightarrow 0$

$$\lim_{r_{12} \rightarrow 0} \rho^{(1)}(r_{12}) = \rho. \quad (2.62)$$

Definitionsgemäß ist das Diagonalelement der Einteilchendichte in Ortsdarstellung gerade die mittlere Dichte  $\rho$  der Materie.

Analog zur Ortsdarstellung läßt sich die Einteilchendichtematrix in Impulsdarstellung definieren. Da der Impulsoperator und der Dichteoperator (2.59) eine simultane Eigenbasis besitzen ist die Dichtematrix in der Impulsdarstellung diagonal. Unter Verwendung der diskreten Impulseigenbasis mit periodischen Randbedingungen, die auch



in der Darstellung des Dichteoperators auftritt, entspricht das diagonale Matrixelement gerade der Besetzungszahl  $n(k, m)$

$$n(k, m) = n^{(1)}(k, m) = \langle \vec{k}, m | \rho^{(1)} | \vec{k}, m \rangle = \Theta(k_F - k), \quad (2.63)$$

wobei  $\Theta(x)$  die Stufenfunktion bezeichnet. Wegen der Isotropie des Problems sind die Diagonalelemente nur vom Betrag des Impulses abhängig. Eine entsprechende Auswertung des Matrixelementes in einer kontinuierlichen Impulsbasis, d.h. ohne periodische Randbedingungen, liefert die Impulsraumdichte

$$\rho^{(1)}(k, m) = \frac{V}{(2\pi)^3} n(k, m). \quad (2.64)$$

Sie unterscheidet sich von den Besetzungszahlen lediglich um das inverse Volumen einer Impulsraumzelle. Durch Spurbildung im Spin-Isospinraum wird schließlich der Impulsanteil der Besetzungszahlen analog zu (2.61) definiert:

$$n(k) = \sum_m^\lambda n(k, m) = \lambda \Theta(k_F - k). \quad (2.65)$$

Zwischen den Diagonalelementen der Einteilchendichte in Impulsdarstellung bzw. den Besetzungszahlen und der Einteilchendichtematrix in Ortsdarstellung besteht ein allgemeiner Zusammenhang, der sich durch Einschleiben zweier Einsoperatoren in Ortsdarstellung in Gleichung (2.63) offenbart:

$$\begin{aligned} n(k) &= \frac{(2\pi)^3}{V} \rho^{(1)}(k) = \int_V d^3 r_{12} \exp\{-i \vec{k} \cdot \vec{r}_{12}\} \rho^{(1)}(r_{12}) \\ &= 4\pi \int dr_{12} r_{12}^2 \frac{\sin(k r_{12})}{k r_{12}} \rho^{(1)}(r_{12}). \end{aligned} \quad (2.66)$$

Die Besetzungszahlen im Impulsraum sind also durch die Fouriertransformierte der Außerdiagonalelemente der Einteilchendichte in Ortsdarstellung gegeben. Diese Beziehung wird verwendet werden, um die Besetzungszahlen in nichttrivialen Fällen zu bestimmen, z.B. für die Ableitung der korrelierten Besetzungszahlen aus der korrelierten Einteilchendichte in Ortsdarstellung.

### 2.2.2 Zweiteilchendichtematrix

Analog zur Einteilchendichte lassen sich Operator und Matrixelemente der Zweiteilchendichte formulieren. Die allgemeine Zweiteilchendichtematrix, dargestellt in einer beliebigen Einteilchenbasis, lautet

$$\rho^{(2)}(\alpha_1, \alpha_2; \alpha_3, \alpha_4) := \langle \mathbf{a}^\dagger(\alpha_3) \mathbf{a}^\dagger(\alpha_4) \mathbf{a}(\alpha_2) \mathbf{a}(\alpha_1) \rangle \quad (2.67)$$

mit den entsprechenden Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren  $\mathbf{a}^\dagger(\alpha)$  bzw.  $\mathbf{a}(\alpha)$ . Der entsprechende Zweiteilchendichteoperator in dieser Basis ist durch

$$\rho^{(2)} = \sum_{\substack{\alpha_1 < \alpha_2 \\ \alpha_3 < \alpha_4}} |\alpha_1, \alpha_2\rangle_- \rho^{(2)}(\alpha_1, \alpha_2; \alpha_3, \alpha_4) \langle \alpha_3, \alpha_4|_- \quad (2.68)$$

gegeben, wobei  $|\alpha_1, \alpha_2\rangle_-$  einen antisymmetrisierten Produktzustand zweier Zustände der Einteilchenbasis bezeichnet.

Wenn der Vielteilchenzustand durch eine Slaterdeterminante von Einteilchenzuständen aus einer Basis  $\{|\eta\rangle\}$  gegeben ist, dann ist die Dichtematrix in der antisymmetrisierten Produktbasis dieser Zustände diagonal. Für den Dichteoperator gilt

$$\begin{aligned}\rho^{(2)} &= \sum_{\eta_1 < \eta_2} |\eta_1, \eta_2\rangle_- n^{(2)}(\eta_1, \eta_2) \langle \eta_1, \eta_2| \\ &= \sum_{\eta_1 < \eta_2} (|\eta_1, \eta_2\rangle - |\eta_2, \eta_1\rangle) n^{(2)}(\eta_1, \eta_2) \langle \eta_1, \eta_2|.\end{aligned}\quad (2.69)$$

Die Diagonalelemente  $n^{(2)}(\eta_1, \eta_2)$  der Dichtematrix lassen sich als Paarbesetzungszahlen interpretieren, die angeben, mit welcher Wahrscheinlichkeit sowohl der Zustand  $\eta_1$  als auch der Zustand  $\eta_2$  besetzt sind. Wie man sich leicht überzeugt, sind die mit den Einteilchen-Besetzungszahlen durch  $n^{(2)}(\eta_1, \eta_2) = n(\eta_1)n(\eta_2) - \delta_{\eta_1\eta_2} n(\eta_1)$  verknüpft.

In der speziellen Anwendung auf ein homogenes Fermigas, das durch eine Slaterdeterminante von Einteilchenzuständen  $|i\rangle = |\vec{k}_i, m_i\rangle$  mit Impuls  $\vec{k}_i$  und Spin-Isospinquantenzahl  $m_i$  beschrieben wird, lautet der Zweiteilchendichteoperator

$$\rho^{(2)} = \sum_{k < k'}^{k_F} \sum_{m < m'}^{\lambda} (|k, m; k', m'\rangle - |k', m'; k, m\rangle) \langle k, m; k', m'|. \quad (2.70)$$

Die Dichtematrix in Ortsdarstellung läßt sich in diesem Fall als Produkt von Einteilchendichtematrizen formulieren:

$$\begin{aligned}\rho^{(2)}(\vec{x}_1, m_1, \vec{x}_2, m_2; \vec{x}_3, m_3, \vec{x}_4, m_4) \\ = \frac{1}{2\lambda^2} [\rho^{(1)}(r_{13}) \delta_{m_1 m_3} \rho^{(1)}(r_{24}) \delta_{m_2 m_4} - \rho^{(1)}(r_{14}) \delta_{m_1 m_4} \rho^{(1)}(r_{23}) \delta_{m_2 m_3}]\end{aligned}\quad (2.71)$$

mit  $r_{ij} = |\vec{x}_i - \vec{x}_j|$ . Der Ortsraumanteil der Zweiteilchendichtematrix wird wie im Einteilchenfall durch Spurbildung über die Spin-Isospinfreiheitsgrade definiert:

$$\begin{aligned}\rho^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2; \vec{x}_3, \vec{x}_4) &= \sum_{m, m'}^{\lambda} \rho^{(2)}(\vec{x}_1, m, \vec{x}_2, m'; \vec{x}_3, m, \vec{x}_4, m') \\ &= \rho^{(1)}(r_{13})\rho^{(1)}(r_{24}) - \frac{1}{\lambda}\rho^{(1)}(r_{14})\rho^{(1)}(r_{23}).\end{aligned}\quad (2.72)$$

Schließlich werden die Diagonalelemente der Zweiteilchendichtematrix in Ortsdarstellung durch den Grenzübergang  $\vec{x}_3 \rightarrow \vec{x}_1, \vec{x}_4 \rightarrow \vec{x}_2$  bestimmt:

$$\rho^{(2)}(r_{12}) = \lim_{\substack{\vec{x}_3 \rightarrow \vec{x}_1 \\ \vec{x}_4 \rightarrow \vec{x}_2}} \rho^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2; \vec{x}_3, \vec{x}_4) = \rho^2 - \frac{1}{\lambda} [\rho^{(1)}(r_{12})]^2, \quad (2.73)$$

Ein wichtiger Punkt ist die Beziehung zwischen verschiedenen  $n$ -Teilchendichten, hier insbesondere zwischen Einteilchendichte und Zweiteilchendichte. Aus der Definition der Zweiteilchendichtematrix (2.67) läßt sich ablesen, daß durch Spurbildung über die Zustände  $\alpha_2$  und  $\alpha_4$  gerade der Teilchenzahloperator

$$\mathbf{N} = \sum_{\alpha} \mathbf{a}^{\dagger}(\alpha) \mathbf{a}(\alpha) \quad (2.74)$$

dargestellt wird, der auf den um ein Teilchen dezimierten Vielteilchenzustand wirkt. Daraus ergibt sich folgender Zusammenhang zwischen der Zwei- und Einteilchendichtematrix:

$$\sum_{\alpha} \rho^{(2)}(\alpha_1, \alpha; \alpha_2, \alpha) = (A - 1) \rho^{(1)}(\alpha_1; \alpha_2) \quad (2.75)$$

Somit gilt für die Zweiteilchendichtematrix in Ortsdarstellung bzw. deren Ortsraumanteil die allgemeine Reduktionsvorschrift

$$\rho^{(1)}(r_{12}) = \frac{1}{\rho V - 1} \int_V d^3x \rho^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{x}; \vec{x}_2, \vec{x}) \quad (2.76)$$

mit  $A = \rho V$ .

### 2.2.3 Korrelierte Zweiteilchendichtematrix

Bisher wurde der Korrelationsoperator in seiner Wirkung auf Zustände bzw. Wellenfunktionen auf der einen Seite und Operatoren auf der anderen Seite betrachtet. Nun stellt sich die Frage, wie sich die unitären Korrelationen auf Dichtematrizen auswirken.

Zunächst wird die Zweiteilchendichte untersucht. Da die Wirkung des Korrelationsoperators im Ortsraum durch eine einfache Koordinatentransformation beschrieben werden kann, bietet es sich an, die Dichtematrix (2.67) in Ortsdarstellung zu betrachten. Mit den Feldoperatoren  $\psi_i^\dagger = \psi^\dagger(\vec{x}_i, m_i)$  bzw.  $\psi_i = \psi(\vec{x}_i, m_i)$ , die ein Teilchen mit Spin-Isospinquantenzahl  $m_i$  und am Ort  $\vec{x}_i$  erzeugen bzw. vernichten, lautet die unkorrelierte Dichtematrix

$$\rho^{(2)}(\vec{x}_1, m_1, \vec{x}_2, m_2; \vec{x}_3, m_3, \vec{x}_4, m_4) = \langle \psi_3^\dagger \psi_4^\dagger \psi_2 \psi_1 \rangle. \quad (2.77)$$

Die korrelierte Dichtematrix ist definiert durch

$$\tilde{\rho}^{(2)}(\vec{x}_1, m_1, \vec{x}_2, m_2; \vec{x}_3, m_3, \vec{x}_4, m_4) = \langle \mathbf{C}^\dagger \psi_3^\dagger \psi_4^\dagger \psi_2 \psi_1 \mathbf{C} \rangle. \quad (2.78)$$

Der Operator  $\mathbf{C}^\dagger \psi_3^\dagger \psi_4^\dagger \psi_2 \psi_1 \mathbf{C}$  ist durch die Wirkung des unitären Korrelators kein reiner Zweiteilchenoperator mehr, sondern enthält Komponenten zu allen Teilchenzahlen  $n \geq 2$ . Wie für die üblichen Observablen, z.B. das Zweiteilchenpotential, läßt sich eine Clusterentwicklung für den korrelierten Dichteoperator durchführen (siehe Abschnitt 1.3.2). Die Zerlegung des Erwartungswertes in irreduzible Komponenten zur Teilchenzahl  $n$  lautet formal

$$\langle \mathbf{C}^\dagger \psi_3^\dagger \psi_4^\dagger \psi_2 \psi_1 \mathbf{C} \rangle = \sum_{n=2}^A \langle [\mathbf{C}^\dagger \psi_4^\dagger \psi_3^\dagger \psi_2 \psi_1 \mathbf{C}]^{[n]} \rangle. \quad (2.79)$$

Der hochgestellte Index in eckigen Klammern deutet an, daß der irreduzible  $n$ -Teilchenanteil des Operators betrachtet wird. Durch Abbruch dieser Entwicklung nach gegebener Ordnung in der Teilchenzahl werden Näherungen abgeleitet. Im Fall der Dichten wird nur die Zweiteilchennäherung verwendet. Da kein Einteilchenanteil auftritt, trägt in dieser Näherung nur der Zweiteilchenterm, der durch den Erwartungswert des korrelierten Operators im Zweiteilchenraum gegeben ist, bei

$$\langle [\mathbf{C}^\dagger \psi_3^\dagger \psi_4^\dagger \psi_2 \psi_1 \mathbf{C}]^{C^2} \rangle = \langle [\mathbf{C}^\dagger \psi_3^\dagger \psi_4^\dagger \psi_2 \psi_1 \mathbf{C}]^{[2]} \rangle = \langle \mathbf{C}^\dagger \psi_3^\dagger \psi_4^\dagger \psi_2 \psi_1 \mathbf{C} \rangle_2 \quad (2.80)$$

Das Symbol „C2“ wird wie in den vorangehenden Abschnitten zur Kennzeichnung der Zweiteilchennäherung verwendet. Der tiefgestellte Index an den Klammern des Erwartungswertes deutet die Teilchenzahl des Raumes an, in dem der Erwartungswert gebildet wird. Für eine Slaterdeterminante aus Einteilchenzuständen (2.58) als unkorreliertem Vielteilchenzustand bedeutet das

$$\langle \dots \rangle_2 = \sum_{i < j}^A \langle ij | \dots (|ij\rangle - |ji\rangle). \quad (2.81)$$

Die in Zweiteilchennäherung korrelierte Zweiteilchendichtematrix in Ortsdarstellung lautet also

$$\begin{aligned} & \tilde{\rho}^{(2)C2}(\vec{x}_1, m_1, \vec{x}_2, m_2; \vec{x}_3, m_3, \vec{x}_4, m_4) \\ &= \langle \vec{x}_1, m_1; \vec{x}_2, m_2 | \mathbf{C} \boldsymbol{\rho}^{(2)} \mathbf{C}^\dagger | \vec{x}_3, m_3; \vec{x}_4, m_4 \rangle \\ &= \sum_{i < j}^A \langle ij | \mathbf{C}^\dagger | \vec{x}_3, m_3, \vec{x}_4, m_4 \rangle \langle \vec{x}_1, m_1, \vec{x}_2, m_2 | \mathbf{C} (|ij\rangle - |ji\rangle) \end{aligned} \quad (2.82)$$

Mit Hilfe der Ergebnisse aus Abschnitt 1.2 lassen sich die korrelierten Zweiteilchenzustände in Ortsdarstellung direkt durch die unkorrelierten Zustände und die Korrelationsfunktion  $R_-(r)$  ausdrücken:

$$\langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | \mathbf{C} | ij \rangle = \mathcal{R}_-(r_{12}) \langle (\vec{x}_1 + \Delta_-(r_{12}) \vec{n}_{12}), (\vec{x}_2 - \Delta_-(r_{12}) \vec{n}_{12}) | ij \rangle. \quad (2.83)$$

Dabei bezeichnen

$$\Delta_\pm(r_{ij}) = \frac{1}{2} (R_\pm(r_{ij}) - r_{ij}) \quad \text{bzw.} \quad \vec{n}_{ij} = \vec{r}_{ij}/r_{ij} \quad (2.84)$$

die Verschiebedistanz bzw. den Einheitsvektor in Richtung der Relativkoordinate. Durch eine dem unkorrelierten Fall analoge Rechnung ergibt sich nach Spurbildung im Spin-Isospinraum der Ortsanteil der korrelierten Zweiteilchendichtematrix

$$\begin{aligned} & \tilde{\rho}^{(2)C2}(\vec{x}_1, \vec{x}_2; \vec{x}_3, \vec{x}_4) \\ &= \mathcal{R}_-(r_{12}) \mathcal{R}_-(r_{34}) \left( \rho^{(1)}(\tilde{r}_{13}) \rho^{(1)}(\tilde{r}_{24}) - \frac{1}{\lambda} \rho^{(1)}(\tilde{r}_{14}) \rho^{(1)}(\tilde{r}_{23}) \right) \end{aligned} \quad (2.85)$$

mit den durch den Korrelator modifizierten Abstandsvariablen

$$\begin{aligned} \tilde{r}_{13} &= |\vec{r}_{13} + \Delta_-(r_{12}) \vec{n}_{12} - \Delta_-(r_{34}) \vec{n}_{34}| \\ \tilde{r}_{24} &= |\vec{r}_{24} - \Delta_-(r_{12}) \vec{n}_{12} + \Delta_-(r_{34}) \vec{n}_{34}| \\ \tilde{r}_{14} &= |\vec{r}_{14} + \Delta_-(r_{12}) \vec{n}_{12} + \Delta_-(r_{34}) \vec{n}_{34}| \\ \tilde{r}_{23} &= |\vec{r}_{23} - \Delta_-(r_{12}) \vec{n}_{12} - \Delta_-(r_{34}) \vec{n}_{34}|. \end{aligned} \quad (2.86)$$

Der Vergleich der analytischen Struktur mit der unkorrelierten Zweiteilchendichte zeigt die typischen Elemente, die auch bei korrelierten Wellenfunktionen auftreten: Metrifaktoren und transformierte Radialkoordinaten. Betrachtet man die Diagonalelemente der korrelierten Zweiteilchendichtematrix durch den Übergang  $\vec{x}_3 \rightarrow \vec{x}_1, \vec{x}_4 \rightarrow \vec{x}_2$  so folgt

$$\tilde{\rho}^{(2)C2}(r_{12}) = \mathcal{R}_-^2(r_{12}) \left( \rho^2 - \frac{1}{\lambda} [\rho^{(1)}(R_-(r_{12}))]^2 \right). \quad (2.87)$$

Hier zeigt sich die direkte Analogie zur Struktur der korrelierten Zweiteilchenwellenfunktion: Die Relativkoordinate wird mit der Funktion  $R_-(r)$  transformiert und die Gesamtfunktion wird mit einem Metrikfaktor multipliziert.

Die Unitarität der Transformation spiegelt sich in der Erhaltung des Integrals über die Diagonalelemente der korrelierten Zweiteilchendichte wider

$$\rho = \frac{1}{\rho V - 1} \int_V d^3r \rho^{(2)}(r) = \frac{1}{\rho V - 1} \int_V d^3r \tilde{\rho}^{(2)C_2}(r). \quad (2.88)$$

Die Identität läßt sich beweisen, indem man den Ausdruck für die korrelierte Zweiteilchendichte einsetzt und das Integral der inversen Koordinatentransformation  $R_+(r)$  unterzieht. So ergibt sich unmittelbar der Ausdruck für die unkorrelierte Zweiteilchendichte. Wie später am Beispiel gezeigt wird, wird die durch den Korrelator verdrängte Stärke bei kurzen Reichweiten gerade durch eine Überhöhung bei größeren Reichweiten aufgewogen (vergleiche Abbildung 3.16).

### 2.2.4 Korrelierte Einteilchendichtematrix

Entsprechend der Zweiteilchendichte kann auch die korrelierte Einteilchendichte behandelt werden. Zunächst wird die korrelierte Einteilchendichtematrix durch den Erwartungswert

$$\tilde{\rho}^{(1)}(\vec{x}_1; \vec{x}_2) = \langle \mathbf{C}^\dagger \psi_2^\dagger \psi_1 \mathbf{C} \rangle \quad (2.89)$$

definiert. Der Operator  $\mathbf{C}^\dagger \psi_2^\dagger \psi_1 \mathbf{C}$  ist auch hier eine Superposition von Beiträgen zu allen Teilchenzahlen. Die Clusterentwicklung für den Erwartungswert lautet formal

$$\langle \mathbf{C}^\dagger \psi_2^\dagger \psi_1 \mathbf{C} \rangle = \sum_{n=1}^A \langle [\mathbf{C}^\dagger \psi_2^\dagger \psi_1 \mathbf{C}]^{[n]} \rangle. \quad (2.90)$$

Hier tritt im Gegensatz zur korrelierten Zweiteilchendichte auch ein Einteilchenterm in der Clusterentwicklung auf. Ein- und Zweiteilchenbeitrag sind gegeben durch

$$\begin{aligned} \langle [\mathbf{C}^\dagger \psi_2^\dagger \psi_1 \mathbf{C}]^{[1]} \rangle &= \langle \psi_2^\dagger \psi_1 \rangle_1 = \langle \psi_2^\dagger \psi_1 \rangle \\ \langle [\mathbf{C}^\dagger \psi_2^\dagger \psi_1 \mathbf{C}]^{[2]} \rangle &= \langle \mathbf{C}^\dagger \psi_2^\dagger \psi_1 \mathbf{C} - \psi_2^\dagger \psi_1 \rangle_2. \end{aligned} \quad (2.91)$$

Der Einteilchenbeitrag ist gerade die unkorrelierte Einteilchendichtematrix; der Zweiteilchenanteil steht in enger Beziehung zur korrelierten Zweiteilchendichte. Da der Erwartungswert des Zweiteilchenanteils im Zweiteilchenraum berechnet wird, kann in den ersten Summanden ein Teilchenzahloperator eingeschoben werden, der im um ein Teilchen reduzierten Zweiteilchenraum gerade 1 ist

$$\langle \mathbf{C}^\dagger \psi_2^\dagger \psi_1 \mathbf{C} \rangle_2 = \langle \mathbf{C}^\dagger \psi_2^\dagger \mathbf{N} \psi_1 \mathbf{C} \rangle_2 = \sum_{m_3}^{\lambda} \int d^3x_3 \langle \mathbf{C}^\dagger \psi_2^\dagger \psi_3^\dagger \psi_3 \psi_1 \mathbf{C} \rangle_2. \quad (2.92)$$

Für den zweiten Term führt das Einschieben des Teilchenzahloperators gerade auf eine unkorrelierte Zweiteilchendichte mit Spurbildung über eine Koordinate, die sich vermittle der Reduktionseigenschaft (2.75) als eine Einteilchendichte schreiben läßt:

$$\langle \psi_2^\dagger \psi_1 \rangle_2 = \sum_{m_3}^{\lambda} \int d^3x_3 \langle \psi_2^\dagger \psi_3^\dagger \psi_3 \psi_1 \rangle_2 = (A - 1) \langle \psi_2^\dagger \psi_1 \rangle. \quad (2.93)$$

Zusammengenommen ergibt sich für den Zweiteilchenanteil der korrelierten Einteilchendichtematrix

$$\begin{aligned} \langle [\mathbf{C}^\dagger \psi_2^\dagger \psi_1 \mathbf{C}]^{[2]} \rangle &= \sum_{m_3}^{\lambda} \int d^3x_3 \langle \mathbf{C}^\dagger \psi_2^\dagger \psi_3^\dagger \psi_3 \psi_1 \mathbf{C} \rangle_2 - \langle \psi_2^\dagger \psi_3^\dagger \psi_3 \psi_1 \rangle_2 \\ &= \sum_{m_3}^{\lambda} \int d^3x_3 \langle \mathbf{C}^\dagger \psi_2^\dagger \psi_3^\dagger \psi_3 \psi_1 \mathbf{C} \rangle_2 - (A-1) \langle \psi_2^\dagger \psi_1 \rangle. \end{aligned} \quad (2.94)$$

Nach Spurbildung über die Spin-Isospinfreiheitsgrade folgt für den Ortsraumanteil der korrelierten Einteilchendichten

$$\tilde{\rho}^{(1)C2}(r_{12}) = \rho^{(1)}(r_{12}) + \tilde{\rho}^{(1)[2]}(r_{12}), \quad (2.95)$$

wobei die Korrektur  $\tilde{\rho}^{(1)[2]}(r_{12})$  zur unkorrelierten Einteilchendichte entsprechend (2.94) durch

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}^{(1)[2]}(r_{12}) &= \int_V d^3x_3 [\tilde{\rho}^{(2)C2}(\vec{x}_1, \vec{x}_3; \vec{x}_2, \vec{x}_3) - \rho^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{x}_3; \vec{x}_2, \vec{x}_3)] \\ &= \int_V d^3x_3 \tilde{\rho}^{(2)C2}(\vec{x}_1, \vec{x}_3; \vec{x}_2, \vec{x}_3) - (\rho V - 1) \rho^{(1)}(r_{12}) \end{aligned} \quad (2.96)$$

gegeben ist. Für das Integral über die korrelierte Zweiteilchendichte gilt mit (2.85)

$$\begin{aligned} &\int_V d^3x_3 \tilde{\rho}^{(2)C2}(\vec{x}_1, \vec{x}_3; \vec{x}_2, \vec{x}_3) \\ &= \int_V d^3x_3 \mathcal{R}_-(r_{13}) \mathcal{R}_-(r_{23}) \left[ \rho^{(1)}(\tilde{r}_{12}) \rho^{(1)}(\tilde{r}_{33}) - \frac{1}{\lambda} \rho^{(1)}(\tilde{r}_{13}) \rho^{(1)}(\tilde{r}_{32}) \right] \end{aligned} \quad (2.97)$$

mit den transformierten Abstandsvariablen

$$\begin{aligned} \tilde{r}_{12} &= |\vec{r}_{12} + \Delta_-(r_{13})\vec{n}_{13} - \Delta_-(r_{23})\vec{n}_{23}| \\ \tilde{r}_{33} &= |-\Delta_-(r_{13})\vec{n}_{13} + \Delta_-(r_{23})\vec{n}_{23}| \\ \tilde{r}_{13} &= |\vec{r}_{13} + \Delta_-(r_{13})\vec{n}_{13} + \Delta_-(r_{23})\vec{n}_{23}| \\ \tilde{r}_{32} &= |\vec{r}_{32} - \Delta_-(r_{13})\vec{n}_{13} - \Delta_-(r_{23})\vec{n}_{23}|. \end{aligned} \quad (2.98)$$

Die Symmetrien des Problems erlauben eine weitere Vereinfachung der Integration. Da die Einteilchendichte nur vom Abstand  $r_{12}$  abhängt, wähle man o.B.d.A.  $\vec{x}_2 = 0$  und  $\vec{x}_1 = r_{12}\vec{e}_z$ . Die Koordinate  $\vec{x}_3$  kann in Zylinderkoordinaten  $(\varrho, z, \varphi)$  ausgedrückt und die  $\varphi$ -Integration trivial ausgeführt werden. Mit dem Zylindervolumen  $V = 2\pi R^2 H$  ergibt sich

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}^{(1)[2]}(r_{12}) &= (1 - \rho V) \rho^{(1)}(r_{12}) + 2\pi \int_0^R \int_{-H}^H d\varrho dz \varrho \times \\ &\times \mathcal{R}_-(r_{13}) \mathcal{R}_-(r_{23}) \left[ \rho^{(1)}(\tilde{r}_{12}) \rho^{(1)}(\tilde{r}_{33}) - \frac{1}{\lambda} \rho^{(1)}(\tilde{r}_{13}) \rho^{(1)}(\tilde{r}_{32}) \right], \end{aligned} \quad (2.99)$$

mit den transformierten Abstandsvariablen nach (2.98) und

$$\vec{r}_{12} = r_{12}\vec{e}_z \quad \vec{r}_{13} = \varrho\vec{e}_\varrho + (r_{12} - z)\vec{e}_z \quad \vec{r}_{23} = \varrho\vec{e}_\varrho + z\vec{e}_z. \quad (2.100)$$

Die verbleibenden Integrationen über  $\varrho$  und  $z$  sind numerisch auszuführen.

Abschließend ein Kommentar zur Normierung der korrelierten Einteilchendichte und zur Reduktionsbeziehung zwischen Zwei- und Einteilchendichte. Das Diagonalelement  $r_{12} = 0$  der korrelierten Einteilchendichte ist weiterhin auf die mittlere Dichte  $\rho$  normiert. Das ist leicht zu zeigen, indem im Zweiteilchenteil (2.96) der korrelierten Einteilchendichte  $\vec{x}_1 = \vec{x}_2$  gesetzt wird. Nach (2.88) ist die Differenz der verbleibenden Integrale über die Diagonalelemente der korrelierten bzw. unkorrelierten Zweiteilchendichte gerade Null, d.h. das Diagonalelement der Zweiteilchenkorrektur zur korrelierten Einteilchendichte verschwindet. Demnach bleibt nur das Diagonalelement der unkorrelierte Einteilchenanteil, das klarerweise auf  $\rho$  normiert ist. Die mittlere Dichte  $\rho$  des Systems ist also invariant unter Anwendung des Korrelators.

Ein wichtiger Punkt ist die Reduktionsbeziehung (2.76) zwischen Zwei- und Einteilchendichten. Sie ist für die korrelierten Dichten in Zweiteilchennäherung nicht mehr gültig. Das ist eine Konsequenz der abgebrochenen Clusterentwicklung. Es läßt sich zeigen, daß Drei- und Vierteilchenterme in der korrelierten Zweiteilchendichte berücksichtigt werden müßten, um durch Reduktion auf die korrelierte Einteilchendichte zu kommen. Eine Einbeziehung dieser Terme ist aber nicht sinnvoll, da auf diese Weise die Äquivalenz zwischen korrelierten Observablen und korrelierten Dichten bei der Berechnung eines Erwartungswertes im Spurformalismus zerstört würde. In der hier verwendeten Form der korrelierten Dichten kann z.B. der korrelierte Erwartungswert eines Hamiltonoperators entweder mit dem korrelierten Hamiltonoperator in Zweiteilchennäherung und den unkorrelierten Ein- und Zweiteilchendichten oder mit dem unkorrelierten Hamiltonoperator und den korrelierten Ein- und Zweiteilchendichten in Zweiteilchennäherung berechnet werden. Diese Konsistenzeigenschaft wäre durch Hinzunahme weiterer Terme in der korrelierten Zweiteilchendichte verloren.

## Kapitel 3

---

# Zwei Modelluntersuchungen: Die Homework-Probleme

Als erste Anwendung der Ergebnisse des vorangehenden Kapitels sollen zwei schematische Modellsysteme untersucht werden, die bereits seit Mitte der 70er Jahren zum Vergleich der verschiedensten Methoden der Vielteilchentheorie benutzt werden: Das *Homework-1* und das *Homework-2*-Problem. Beide zielen auf die Zustandsgleichung von Kern- bzw. Neutronenmaterie mit schematischen Modellpotentialen, die auf die problematischen Elemente realistischer NN-Wechselwirkungen, insbesondere den stark abstoßenden kurzreichweitigen Core, reduziert sind. Das Homework-1-Potential besteht nur aus einem abstoßenden Yukawa-Core, das Homework-2-Potential besitzt zusätzlich eine langreichweitige Anziehung. Für beide Szenarien existieren Rechnungen mit den etablierten Methoden der Vielteilchentheorie, darunter Variations-Monte-Carlo- und Fermi-Hypernetted-Chain-Rechnungen, so daß ein umfassender Vergleich mit den Resultaten der Methode der unitären Korrelatoren möglich ist.

### 3.1 Homework-1: Zustandsgleichung in Zweiteilchennäherung

Das erste Szenario — das sog. *Homework-1*-Problem — entspringt einem von H. A. Bethe 1973 vorgeschlagenen Modell zum quantitativen Vergleich der verfügbaren Methoden der Vielteilchenphysik. Aufgabe ist die Berechnung der Zustandsgleichung von Neutronenmaterie ( $\lambda = 2$ ) für ein Zweiteilchenpotential, das aus dem rein abstoßenden Yukawa-Term der  $^1S_0$ -Komponente des Reid-Potentials [Reid68] besteht

$$v_1(r) = 6484.2 \text{ MeV } \exp(-4.9 \text{ fm}^{-1} r)/(0.7 \text{ fm}^{-1} r). \quad (3.1)$$

Dieses Problem wurde von vielen Autoren aufgegriffen, Referenzen auf eine Reihe dieser Arbeiten finden sich in [Clar79]. Um die im folgenden dargestellten Ergebnisse der Methode der unitären Korrelatoren (UCOM) zu beurteilen, werden Resultate zweier prominenter Methoden herangezogen: Eine Monte-Carlo-Variationsrechnung (VMC) [CeCh77] und zwei Fermi-Hypernetted-Chain-Rechnungen (FHNC) [KrTa76, Zabo77].



### 3.1.1 Zweiteilchenoptimaler Korrelator

Der erste Schritt zur Anwendung der Methode der unitären Korrelatoren ist die Bestimmung einer *optimalen* Korrelationsfunktion. Für endliche Systeme wurde bisher [UCOM98, Roth97] immer auf Verfahren zurückgegriffen, die den optimalen Korrelator im Zweiteilchensystem konstruieren. Dabei ist fraglich, ob der optimale Korrelator für das Zweiteilchensystem auch der optimale Korrelator im Vielteilchensystem ist. Hier wird die Untersuchung der Neutronenmaterie Aufschluß geben.

Sei zunächst der optimale Korrelator im Zweiteilchensystem untersucht. Darunter wird im allgemeinen der Korrelator verstanden, der den Energieerwartungswert für das gegebene Potential mit einer konstanten Ansatzwellenfunktion minimiert — sie werden im folgenden als *zweiteilchenoptimale* Korrelatoren bezeichnet. Da es sich bei dem Homework-1-Potential um eine rein abstoßende Wechselwirkung handelt, existiert im Zweiteilchensystem kein in diesem Sinne energetisch optimaler Korrelator. Die Energie läßt sich durch Vergrößern der Reichweite der Korrelationsfunktion immer weiter absenken. Da für die Gültigkeit der Zweiteilchennäherung die Kurzreichweitigkeit des Korrelators Voraussetzung ist, muß dies als Nebenbedingung in die Variation einbezogen werden. Am einfachsten wird das durch Fixierung der Reichweite auf einen gegebenen Wert realisiert, die Variation wird lediglich bezüglich der übrigen Parameter durchgeführt.

Die Korrelationsfunktion  $R_+(r)$  wird durch die mehrfach erprobte Parametrisierung

$$R_+(r) = r + \alpha (r/\beta)^\eta \exp[-\exp(r/\beta)] \quad (3.2)$$

dargestellt. Die Reichweite ist durch den Parameter  $\beta$  gegeben. Für verschiedene Werte des Reichweitensparameters  $\beta$  wird die Energie im Zweiteilchensystem mit konstanter Zweiteilchenwellenfunktion durch Variation der verbleibenden Parameter  $\alpha$  und  $\eta$  minimiert. Durch diese Konstruktion ist der Korrelator durch Angabe des Reichweitensparameters eindeutig bestimmt.

Die Tabelle 3.1 zeigt für einige feste Werte von  $\beta$  die aus der Energieminimierung resultierenden Parameter  $\alpha$  und  $\eta$  sowie das Korrelationsvolumen  $V_C$  (1.18) und die Zweiteilchenenergie in Einheiten der unkorrelierten Energie. Im folgenden werden insbesondere die Korrelationsfunktionen zu  $\beta = 1.2, 1.5$  bzw.  $2.0$  fm diskutiert, sie werden kurz mit *I*, *II* bzw. *III* bezeichnet. Die Abbildung 3.1 zeigt die zweiteilchenoptimalen Korrelationsfunktionen *I-III* und die entsprechenden korrelierten konstanten Wellenfunktionen. Die drei dargestellten Korrelatoren unterscheiden sich nicht nur in der Reichweite, sondern auch in der *Stärke* — sie erzeugen unterschiedlich große Löcher in

	$\alpha$ [fm]	$\beta$ [fm]	$\eta$	$V_C$ [fm <sup>3</sup> ]	$E_2$ [rel]
	0	—	—	0	1.0
	2.202	0.75	0.535	0.57	0.731
	2.363	1.0	0.423	1.01	0.699
<i>I</i>	2.421	1.2	0.364	1.38	0.685
<i>II</i>	2.456	1.5	0.305	1.93	0.673
<i>III</i>	2.468	2.0	0.249	2.85	0.663
	2.469	2.5	0.217	3.75	0.659

Tabelle 3.1 · Parameter der energieminimalen Zweiteilchenkorrelatoren bei Variation mit fixiertem Reichweitensparameter  $\beta$ , das Korrelationsvolumen  $V_C$  und die zugehörige Zweiteilchenenergie in Einheiten der unkorrelierten Zweiteilchenenergie.

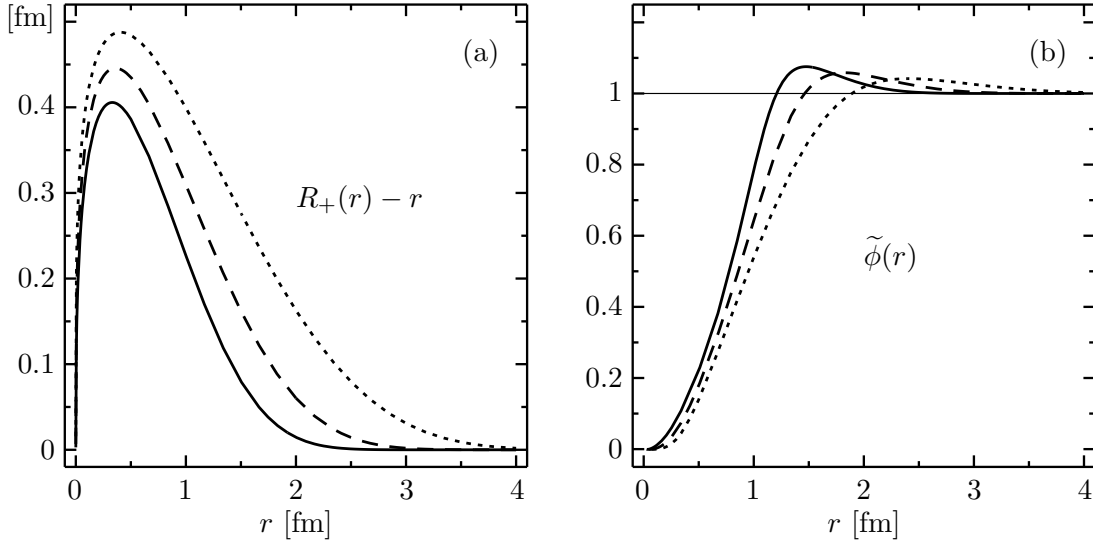


Abbildung 3.1 · Energieminimale Korrelatoren für das Zweiteilchensystem (a) und korrelierte konstante Wellenfunktionen (b) für die Reichweiteparameter  $\beta = 1.2$  fm (—),  $\beta = 1.5$  fm (---) und  $\beta = 2.0$  fm (.....).

der Wellenfunktion und besitzen damit unterschiedliche Korrelationsvolumina.

Dies und die mit der Reichweite sinkende Energie lassen sich auf anschaulicher Basis verstehen. Energetisch kennzeichnen den Korrelator für ein rein abstoßendes Potential stets zwei konträre Effekte: Einerseits reduziert er den Beitrag des abstoßenden Cores durch ein Loch in der Wellenfunktion. Andererseits erzeugt dieses Loch Abstoßung in Form zusätzlicher kinetischer Energie. Die Energieminimierung sucht nach einem Kompromiß zwischen beiden Effekten. Ist der Korrelator auf kurze Reichweite eingeschränkt, dann würde eine maximale Unterdrückung des Cores durch ein großes Loch in der Wellenfunktion zu viel kinetische Energie erzeugen, so daß es im Sinne einer minimalen Gesamtenergie günstiger ist, den Core nicht vollständig zu unterdrücken. Ein langreichweitiger Korrelator kann den Core dagegen besser neutralisieren ohne zu viel kinetische Energie zu erzeugen. Das erklärt auch, warum die Energie mit wachsender Reichweite stetig abnimmt.

### 3.1.2 Materieenergie mit zweiteilchenoptimalen Korrelatoren

Die angegebenen Korrelatoren I-III können benutzt werden, um den korrelierten Energieerwartungswert von Neutronenmaterie in Abhängigkeit von der Dichte bzw. dem Fermiimpuls zu berechnen. Dazu sind zunächst die im korrelierten Hamiltonoperator (2.1) auftretenden Radialabhängigkeiten der lokalen Potentiale und der effektiven Massenkorrekturen entsprechend Abschnitt 1.3.3 durch Einsetzen der zweiteilchenoptimalen Korrelationsfunktionen zu bestimmen. Damit können die in der Zustandsgleichung (2.17) auftretenden Integrale numerisch berechnet werden.

In Abbildung 3.2 sind die einzelnen Beiträge zum Energieerwartungswert in Abhängigkeit vom Reichweiteparameter  $\beta$  des zweiteilchenoptimalen Korrelators bei einer Dichte  $\rho = 1.0 \text{ fm}^{-3}$  ( $k_F = 3.094 \text{ fm}^{-1}$ ) dargestellt. Offenbar besitzt die Gesamtenergie ein Minimum bei  $\beta \approx 1.1$  fm. Eine genauere Untersuchung bei verschiedenen Dichten zeigt, daß das Minimum nur leicht mit der Dichte variiert,  $\beta$  nimmt mit abnehmender

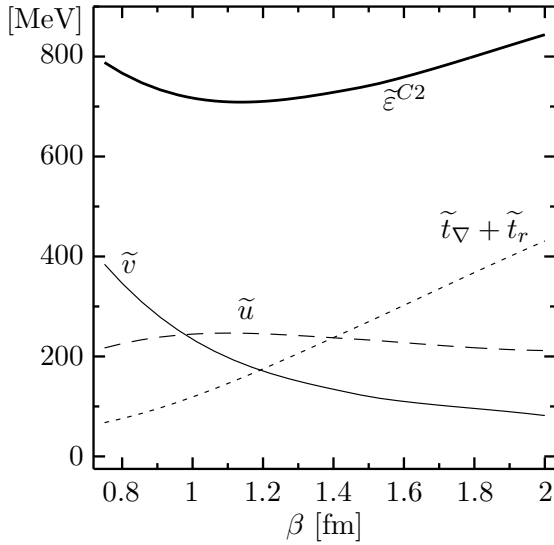


Abbildung 3.2 · Beiträge zur Energie in Abhängigkeit vom Reichweiteparameter  $\beta$  des Korrelators bei der Dichte  $\rho = 1.0 \text{ fm}^{-3}$ : Korrelierter Potentialerwartungswert  $\tilde{v}$  (—), lokaler Anteil der korrelierten kinetischen Energie  $\tilde{u}$  (---), effektiver Massenteil der korrelierten kinetischen Energie  $\tilde{t}_v + \tilde{t}_r$  (-----) und voller Energieerwartungswert  $\tilde{\epsilon}^{C2}$  (—).

Dichte leicht zu.

Die Existenz dieses Minimums ist bemerkenswert, da die Zweiteilchenenergie für ein rein abstoßendes Potential, wie bereits diskutiert, kein solches Minimum besitzt. Gründe hierfür sind zum einen der mit wachsender Korrelatorreichweite sinkende Beitrag des korrelierten Potentials und der ebenfalls sinkende Beitrag des Impulsteils der korrelierten kinetischen Energie. Vergleicht man dies mit den abgebildeten Beiträgen zur Materieenergie, dann offenbart sich ein wesentlicher Unterschied. Zwar sinkt der Beitrag des Potentials ebenfalls mit wachsender Korrelatorreichweite ab, aber der Impulsanteil der korrelierten kinetischen Energie wächst deutlich an und überkompensiert das Abfallen der potentiellen Energie, so daß ein Minimum der Gesamtenergie entsteht. Dieser Unterschied ist direkt mit der Struktur der unkorrelierten Wellenfunktion verknüpft. Damit eröffnet sich die Möglichkeit, den Korrelator durch Energieminimierung in Materie festzulegen — ein optimaler Korrelator endlicher Reichweite existiert. Dies wird im nächsten Abschnitt untersucht werden.

Die Korrelatoren im Bereich des Energieminimums sollen nun benutzt werden, um die Zustandsgleichung für Neutronenmaterie in Abhängigkeit von der Dichte zu untersuchen. Hierzu werden die bereits in Abbildung 3.1 gezeigten Korrelationsfunktionen I-III verwendet.

Die Abbildung 3.3 zeigt die Energie pro Teilchen für Neutronenmaterie in Abhängigkeit von der Dichte  $\rho$  bzw. dem Fermiimpuls  $k_F$  für die drei Korrelatoren<sup>1</sup>. Zudem sind Resultate anderer Rechnungen als Symbole dargestellt: Die Rauten zeigen Resultate einer Variational-Monte-Carlo-Rechnung nach D. Ceperley, G. V. Chester und M. H. Kalos [CeCh77], die Dreiecke eine Fermi-Hypernetted-Chain-Rechnung von E. Krotscheck und K. Takahashi [KrTa76] und die Quadrate eine FHNC-Rechnung von J. G. Zabolitzky [Zabo77] (PB-Korrelationsfunktion mit  $d = 2r_0$ ). Die FHNC-Ansätze unterscheiden sich in den gewählten Korrelationsfunktionen und der Berechnung der Jastrow-korrelierten kinetischen Energien. Eine Beschreibung der Details dieser Rechnungen findet sich in den angegebenen Referenzen.

<sup>1</sup>Im Falle des Homework-1-Potentials sind weder die experimentelle Sättigungsdichte von Kernmaterie noch die Reichweite einer realistischen NN-Wechselwirkung relevante Vergleichsskalen. Die „hohen“ Dichten spiegeln lediglich den Bereich wider, in dem die zum Vergleich herangezogenen Rechnungen durchgeführt wurden.

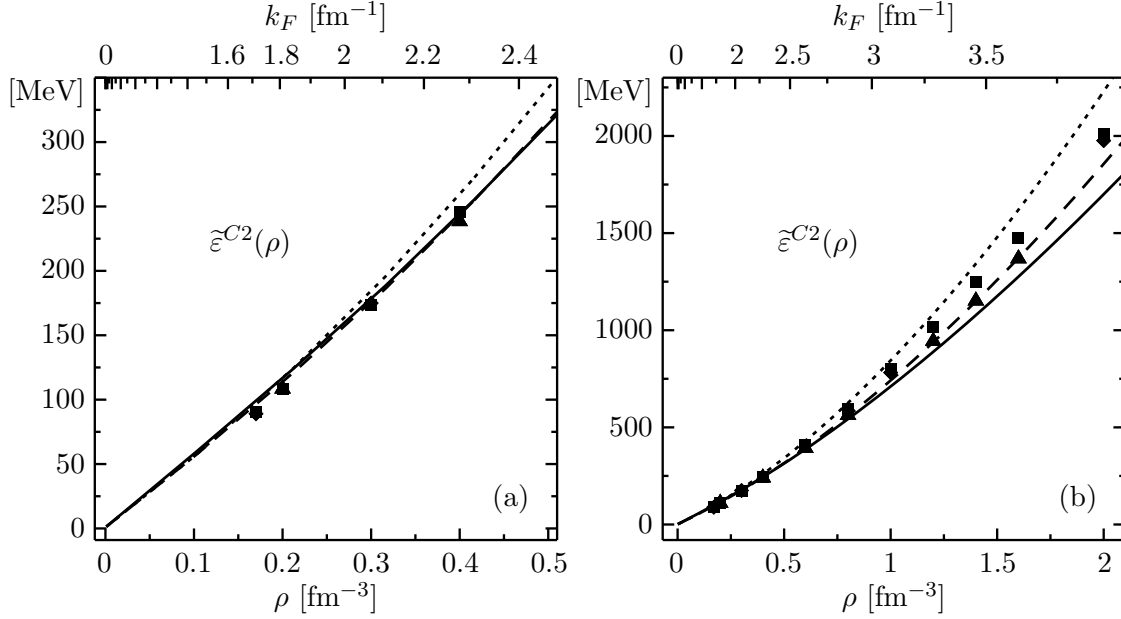


Abbildung 3.3 · Zustandsgleichung  $\tilde{\varepsilon}^{C2}(\rho)$  für Neutronenmaterie in Zweiteilchennäherung für drei ausgewählte Korrelatoren *I* (—), *II* (---) und *III* (.....) mit Parametern nach Tabelle 3.1. Dargestellt ist der Bereich moderater Dichten bis  $\rho = 0.5 \text{ fm}^{-3}$  (a) und der Bereich hoher Dichten bis zu  $2.0 \text{ fm}^{-3}$  (b). Zum Vergleich sind Resultate verschiedener etablierter Methoden angegeben: einer Monte-Carlo-Variationsrechnung (◆) [CeCh77], und zweier Fermi-Hypernetted-Chain Rechnungen (▲) [KrTa76] bzw. (■) [Zabo77]. Der Kleinheitsparameter für die drei Korrelatoren erreicht den Wert  $\kappa \approx 0.3$  bei  $\rho \approx 0.22 \text{ fm}^{-3}$ ,  $0.16 \text{ fm}^{-3}$  bzw.  $0.11 \text{ fm}^{-3}$ .

Die Übereinstimmung der einfachen UCOM-Rechnungen in Zweiteilchennäherung mit den sehr viel aufwendigeren FHNC- bzw. VMC-Rechnungen ist ausgezeichnet. Bis zu Dichten von  $\rho \approx 1 \text{ fm}^{-3}$  stimmen die UCOM Resultate hervorragend mit den übrigen Rechnungen überein. Für Dichten im Bereich  $\rho = 1 \dots 2 \text{ fm}^{-3}$  werden die Vergleichsenergien leicht unterschritten, für den energieminimalen Korrelator bei  $\rho = 2 \text{ fm}^{-3}$  um etwa 10%. Das belegt, daß die Zweiteilchennäherung selbst in diesen Dichteregionen, weit jenseits der üblichen Dichten in Kernen, eine akzeptable Näherung darstellt. Die Beiträge der dritten Clusterordnung sollten entsprechend klein sein.

Betrachtet man die Reichweite der Korrelationsfunktion als freien Parameter unabhängig von der Minimierung der Materieenergie, so läßt sich leicht ein Korrelator angeben, der die Vergleichsrechnungen vollständig reproduziert. So gibt der Korrelator *II* ( $\beta = 1.5 \text{ fm}$ ) die Ergebnisse von Krotscheck und Takahashi ausgezeichnet wieder (vergl. Abbildung 3.3). Analog ergibt sich für  $\beta \approx 1.7 \text{ fm}$  ein Korrelator, der die übrigen Ergebnisse ausgezeichnet beschreibt. Durch Anpassung eines freien Parameters — der Reichweite  $\beta$  — läßt sich also eine sehr einfache effektive Beschreibung der Zustandsgleichung angeben. Darüber hinaus liegt diese effektive Beschreibung sehr nahe bei der parameterfreien Beschreibung auf Basis einer Energieminimierung.

### 3.1.3 Energiebeiträge im Detail

An dieser Stelle sollen die einzelnen Energiebeiträge exemplarisch für die drei zweiteilchenoptimalen Korrelatoren *I-III* bei einer Dichte von  $\rho = 1 \text{ fm}^{-3}$  diskutiert werden. Die Abbildung 3.4 zeigt ein Termschema für die einzelnen Energiebeiträge der drei

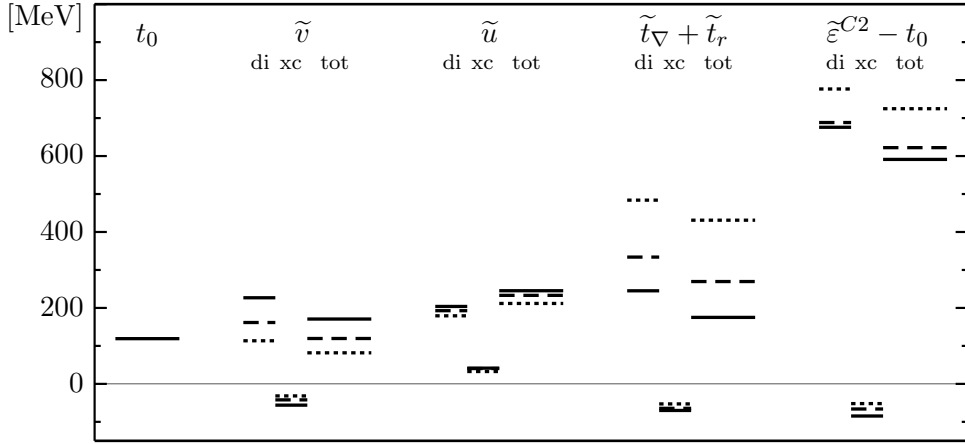


Abbildung 3.4 · Einzelne Energiebeiträge für  $\rho = 1 \text{ fm}^{-3}$  mit den zweiteilchenoptimalen Korrelatoren I (—), II (---) und III (.....). Für die Zweiteilchenterme sind die Beträge des direkten Terms (di) des Austauschterms (xc) und der Gesamtbeitrag (tot) dargestellt.

Korrelatoren. In der ersten Spalte ist die unkorrelierte kinetische Energie  $t_0$  dargestellt, die nur von der Dichte des Systems abhängt. Die zweite Spalte zeigt den Beitrag des korrelierten Potentials  $\tilde{v}$  aufgeteilt in den direkten Term (di) und den Austauschterm (xc) sowie den Gesamtbeitrag (tot). In analoger Aufteilung sind in der dritten Spalte der lokale Anteil  $\tilde{u}$  und in der vierten Spalte der nichtlokale Anteil  $\tilde{t}_\nabla + \tilde{t}_r$  der korrelierten kinetischen Energie dargestellt. Schließlich zeigt die letzte Spalte die Summe aller Zweiteilchenterme, also die Gesamtenergie abzüglich der unkorrelierten kinetischen Energie.

Die erste Beobachtung ist, daß alle Beiträge etwa von der selben Größenordnung sind. Bei allen bisher untersuchten endlichen Systemen, lagen die Beiträge der Potentialteile immer mindestens eine Größenordnung über denen der kinetischen Terme. Die zweite Beobachtung ist, daß die Austauschterme stets etwa eine Größenordnung kleiner als die direkten Terme sind, diese Dominanz erleichtert das anschauliche Verständnis, da die direkten Terme (2.21), (2.24), (2.26) von sehr einfacher Struktur sind.

Man betrachte nun die Beiträge im Hinblick auf die Abhängigkeit von der Korrelatorreichweite: Der Betrag des korrelierten Potentials verringert sich mit zunehmender Korrelatorreichweite — zwischen Korrelator I und III etwa um einen Faktor 1/2. Die Abbildung 3.5(a) zeigt die Radialabhängigkeit des korrelierten Potentials  $\tilde{v}(r)$  für die verschiedenen Korrelatoren, offenbar wird mit zunehmender Korrelatorreichweite und der damit verbundenen zunehmende Größe des Korrelationslochs (Abbildung 3.1) der abstoßende Core des Potentials besser neutralisiert. Somit sinkt der korrelierte Erwartungswert des Potentials mit wachsender Korrelatorreichweite.

Denselben Effekt zeigt auch der lokale Anteil der korrelierten kinetischen Energie, der Erwartungswert sinkt mit wachsender Korrelatorreichweite. Die Abhängigkeit ist jedoch bei weitem nicht so stark wie für das Potential. Zwar zeigt die Radialabhängigkeit des lokalen Teils der korrelierten kinetischen Energie  $\tilde{u}(r)$  eine deutliche Abhängigkeit vom Korrelator (Abbildung 3.5(b)), das Integral über  $r$  ist aber nahezu konstant.

Der nichtlokale Beitrag der korrelierten kinetischen Energie zeigt eine deutlich andere Abhängigkeit von der Korrelatorstärke: Der Erwartungswert nimmt mit der Stärke des Korrelators stark zu — zwischen I und III um mehr als einen Faktor 2. Diese Zunahme

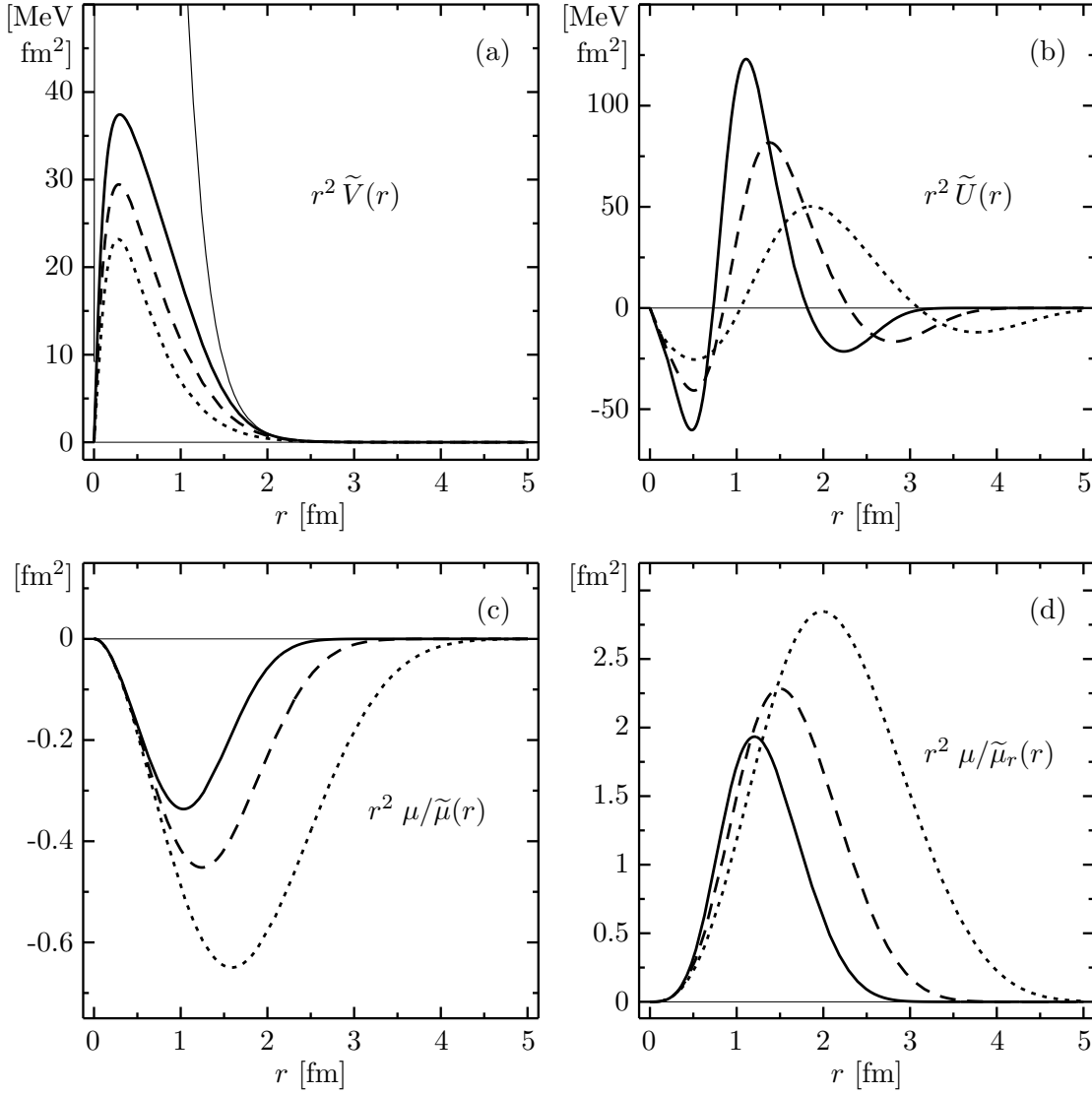


Abbildung 3.5 · Radialabhängigkeiten der Terme des korrelierten Hamiltonoperators für die Korrelatoren I (—), II (---) und III (.....). Dargestellt sind das korrelierte Potential  $\tilde{v}(r)$  im Vergleich zum unkorrelierten Potential (—) (a), der Potentialteil der kinetischen Energie  $\tilde{u}(r)$  (b), die effektive Masse des Gradiententerms der kinetischen Energie  $\mu/\tilde{\mu}(r)$  (c) und des Radialterms  $\mu/\tilde{\mu}_r(r)$  (d). Alle Terme sind mit  $r^2$  multipliziert.

dominiert die Abhängigkeit der Gesamtenergie von der Stärke des Korrelators und führt dazu, daß die Materieenergie bei größeren Korrelatorreichweiten wieder zunimmt und sich so ein Energieminimum im Raum der Parameter des Korrelators bildet. Betrachtet man den Gradienten- und den Radialteil separat, so zeigt sich, daß die Zunahme einzig auf den Radialterm zurückzuführen ist, der Beitrag des Gradiententerms reduziert die Energie mit wachsender Korrelatorstärke, wird aber vom Radialterm überkompensiert. Die Radialabhängigkeiten der beiden effektiven Massen  $\mu/\tilde{\mu}(r)$  und  $\mu/\tilde{\mu}_r(r)$  sind in Abbildung 3.5(c) und (d) dargestellt. Der Gradiententeil liefert demnach einen negativen Erwartungswert, der mit wachsender Korrelatorstärke betragsmäßig zunimmt. Der Radialteil ergibt dagegen einen positiven Erwartungswert, der mit wachsender Korre-

latorstärke ebenfalls zunimmt. In der Summe überwiegt diese Zunahme des Radialteils und der nichtlokale Term wächst mit der Korrelatorstärke.

### 3.1.4 Materieoptimaler Korrelator

Bisher wurde eine Schar von Korrelatoren diskutiert, die durch einen Reichweiteparameter gekennzeichnet sind und deren detaillierte Gestalt durch Energieminimierung im Zweiteilchensystem bestimmt ist (Abschnitt 3.1.2). Die Betrachtung der Energieerwartungswerte für Materie in Abhängigkeit von der Reichweite dieser zweiteilchenoptimalen Korrelatoren zeigt die Existenz eines Minimums in der Materieenergie. Die Existenz dieses Minimums eröffnet die Möglichkeit, die Parameter des Korrelators durch Minimierung der Materieenergie zu bestimmen — diese Korrelatoren werden als *materieoptimale* Korrelatoren bezeichnet.

Die zweiteilchenoptimalen Korrelatoren unterliegen im Vergleich zum materieoptimalen Korrelator der zusätzlichen Nebenbedingung, daß neben der Energie in Materie auch die Energie im Zweiteilchensystem minimal ist. Diese Nebenbedingung ist im Verfahren zu deren Bestimmung verborgen und nicht direkt, z.B. durch die Einführung von Lagrangeparametern, formuliert. Es ist zu erwarten, daß ohne die Nebenbedingung „minimale Zweiteilchenenergie“ niedrigere Materieenergien zu erreichen sind.

Die Energieminimierung durch Variation der drei Parameter des Korrelators (3.2) kann bei gegebener Dichte  $\rho$  ausgeführt werden. Der Erwartungswert der Energie für Neutronenmaterie wird als Funktion der Parameter des Korrelators aufgefaßt und numerisch minimiert. Die resultierenden Parameter sind in Tabelle 3.2 für die Dichten  $\rho = 0.3 \text{ fm}^{-3}$  (IV),  $1.0 \text{ fm}^{-3}$  (V) und  $2.0 \text{ fm}^{-3}$  (VI) zusammen mit dem Korrelationsvolumen aufgeführt. Die Abbildung 3.6(a) zeigt die zugehörigen Korrelationsfunktionen.

Die Korrelationsfunktionen weisen eine deutliche Abhängigkeit von der Dichte auf. Je größer die Dichte desto kurzreichweitiger der materieoptimale Korrelator, dies zeigt sich insbesondere in den Korrelationsvolumina: Sie unterscheiden sich zwischen den Korrelatoren zu  $\rho = 2.0 \text{ fm}^{-3}$  und  $\rho = 0.3 \text{ fm}^{-3}$  um beinahe einen Faktor zwei. Im Vergleich zu den zweiteilchenoptimalen Korrelatoren zeigen die materieoptimalen Korrelatoren eine größere Reichweite und ein schnelleres Abfallen sowie eine steilere Flanke bei kurzen Reichweiten. Offenbar ist die konstante Wellenfunktion, die zur Bestimmung des zweiteilchenoptimalen Korrelators verwendet wurde, kein adäquater Repräsentant für die in der Materierechnung auftretenden Wellenfunktionen.

Die Zustandsgleichungen, die sich mit Hilfe dieser materieoptimalen Korrelatoren ergeben, sind in Abbildung 3.6(b) dargestellt. Trotz des deutlichen Unterschiedes zwischen den Korrelationsfunktionen sind die Unterschiede zwischen den Energieerwartungswerten minimal. Da die für die Minimierung gewählte Dichte keinen signifikanten Einfluß auf die Energieerwartungswerte hat, kann in guter Näherung von einem zustandsunabhängigen — dichteunabhängigen — Korrelator ausgegangen werden. Im folgenden wird nur noch der materieoptimale Korrelator V, der durch Energieminimierung bei

	$\rho \text{ [fm}^{-3}\text{]}$	$\alpha \text{ [fm]}$	$\beta \text{ [fm]}$	$\eta$	$V_C \text{ [fm}^3\text{]}$
IV	0.3	1.294	2.216	0.073	1.27
V	1.0	1.149	1.903	0.070	0.87
VI	2.0	1.049	1.779	0.065	0.69

Tabelle 3.2 · Parameter der Korrelationsfunktionen mit minimaler Energie in Neutronenmaterie bei gegebener Dichte  $\rho$  und Korrelationsvolumen  $V_C$ .



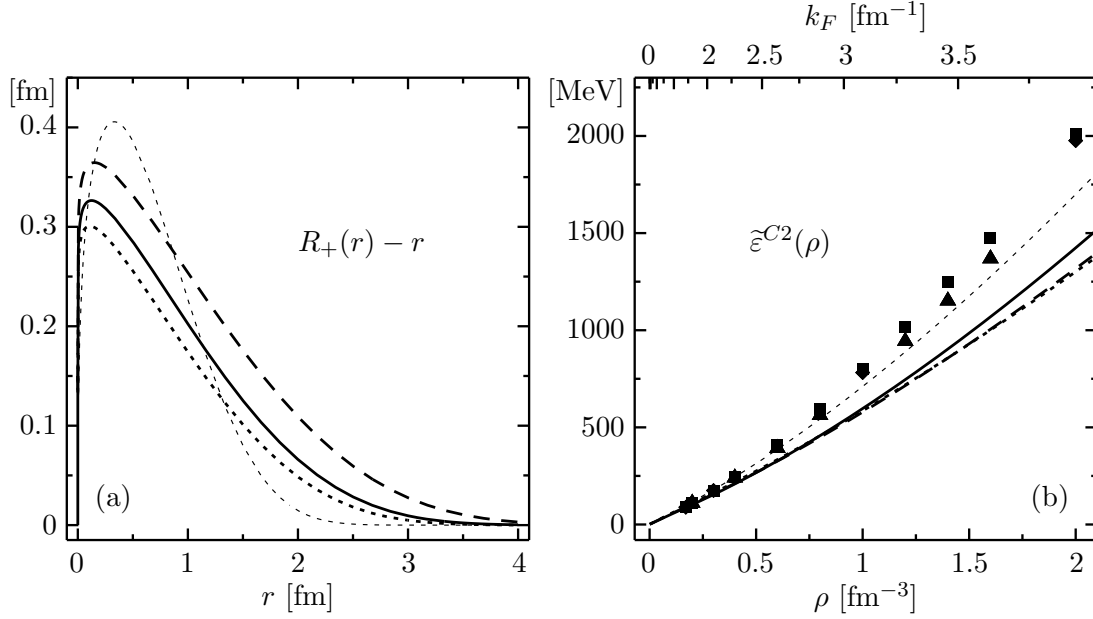


Abbildung 3.6 · (a) Aus Minimierung der Energie für Neutronenmaterie bei verschiedenen Dichten resultierende materieoptimale Korrelationsfunktionen IV (---), V (—) und VI (.....). Im Vergleich dazu der zweiteilchenoptimale Korrelator I (---). (b) Energie pro Teilchen in Abhängigkeit von der Dichte  $\rho$  für die vier gezeigten Korrelatoren. Die Symbole geben Resultate anderer Rechnungen wieder [KrTa76, CeCh77, Zabo77] (vergl. hierzu Abbildung 3.3).

$\rho$ [ $\text{fm}^{-3}$ ]	$k_F$ [ $\text{fm}^{-1}$ ]	$t_0$ [MeV]	$v$ [MeV]	$\varepsilon$ [MeV]	$\tilde{v}$ [MeV]	$\tilde{u}$ [MeV]	$\tilde{t}_\nabla + \tilde{t}_r$ [MeV]	$\tilde{\varepsilon}^{C2}$ [MeV]
0.1	1.436	25.7	132.1	157.8	19.1	9.3	0.2	54.3
0.2	1.809	40.7	274.8	315.5	40.4	20.7	2.7	104.6
0.5	2.455	75.0	736.1	811.1	111.0	55.8	25.9	267.7
1.0	3.094	119.1	1568.8	1687.9	239.4	113.9	106.0	578.4
1.5	3.541	156.0	2449.3	2605.3	374.9	171.5	227.7	930.1
2.0	3.898	189.0	3361.6	3550.6	514.8	228.7	384.9	1317.5

Tabelle 3.3 · Beiträge zur Energie pro Teilchen in Zweiteilchennäherung für den materieoptimalen Korrelator V bei ausgewählten Dichten. Zum Vergleich sind die unkorrelierten Energien angegeben.

$\rho = 1.0 \text{ fm}^{-3}$  bestimmt wurde, verwendet.

In Abbildung 3.7 ist die Zustandsgleichung für den Korrelator V nochmals im Vergleich zu den Resultaten anderer Methoden dargestellt. Zudem ist die unkorrelierte Energie und die mit dem zweiteilchenoptimalen Korrelator I korrelierte Energie aufgetragen. Die Tabelle 3.3 listet die Beiträge der einzelnen Komponenten zur korrelierten und zur unkorrelierten Energie für verschiedene repräsentative Dichten auf. Hier wird der enorme Effekt der Korrelationen deutlich. Durch Einführung des unitären Korrelators wird die Energie auf etwa ein Drittel abgesenkt und befindet sich bei niedrigen



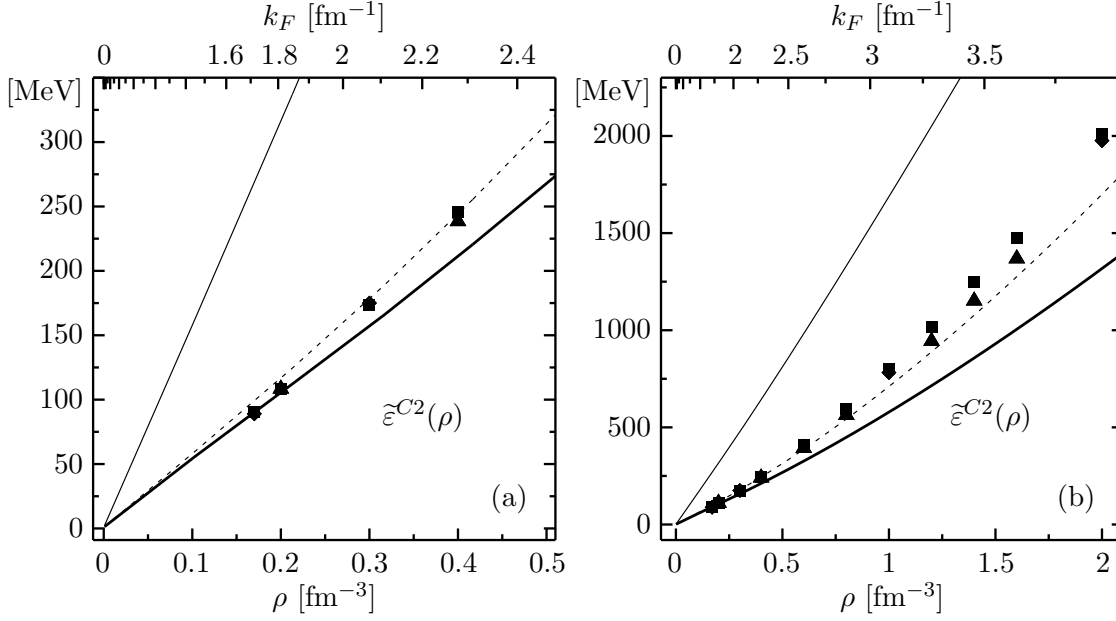


Abbildung 3.7 · Zustandsgleichung  $\tilde{\epsilon}^{C2}(\rho)$  für Neutronenmaterie mit dem materieoptimalen Korrelator V (—). Zum Vergleich ist die Energie für den zweiteilchenoptimalen Korrelator I (-----) und die unkorrelierte Energie (—) angegeben. Der Kleinheitsparameter  $\kappa = \rho V_C$  erreicht den Wert 0.3 für den materieoptimalen Korrelator bei  $\rho \approx 0.34 \text{ fm}^{-3}$  und für den zweiteilchenoptimalen bei  $\rho \approx 0.22 \text{ fm}^{-3}$ . Die Symbole geben Resultate anderer Rechnungen wieder [KrTa76, CeCh77, Zabo77] (vergl. hierzu Abbildung 3.3).

Dichten in sehr guter Übereinstimmung mit den weitaus komplexeren Rechnungen, die zum Vergleich herangezogen wurden. Bei Dichten in der Größenordnung von  $1.0 \text{ fm}^{-3}$  liegen die Energien um rund 15% unter den Referenzdaten. Diese Diskrepanz ist auf die Beiträge der höheren Ordnungen der Clusterentwicklung, die in der Zweiteilchennäherung vernachlässigt werden, zurückzuführen.

Im Vergleich zu den zweiteilchenoptimalen Korrelatoren sind die Energien deutlich abgesenkt — der zweiteilchenoptimale Korrelator beschreibt die Referenzdaten im Bereich hoher Dichten deutlich besser als der materieoptimale Korrelator. Die Vermutung, daß die Aufhebung einer Nebenbedingung bei der Variation, nämlich daß der optimale Korrelator auch eine minimale Zweiteilchenenergie liefert, zu einer Absenkung der Energie führt, ist also bestätigt. Mutmaßlich führt die zusätzliche Nebenbedingung bei den zweiteilchenoptimalen Korrelatoren dazu, daß die Beiträge der höheren Ordnungen der Clusterentwicklung kleiner werden. Um diese Vermutung zu bestätigen oder um andere Nebenbedingungen zur Einschränkung der Beiträge der höheren Ordnungen zu erhalten, ist eine explizite Betrachtung der Dreiteilchenbeiträge nötig.

Schließlich zeigt die Abbildung 3.8(a) die einzelnen Beiträge zur Zustandsgleichung in Zweiteilchennäherung, d.h. unkorrelierte kinetische Energie, korreliertes Potential, den Potentialanteil der kinetischen Energie und die effektiven Massenterme. Daneben ist die Zerlegung der Beiträge der Zweiteilchenoperatoren in den direkten und den Austauschanteil dargestellt. Erstens läßt sich feststellen, daß die Beiträge der Austauschsterme etwa eine Größenordnung unter den direkten Beiträgen liegen und mit schwächerer Potenz in  $k_F$  als die direkten Terme anwachsen. Zweitens zeigt sich, daß der Beitrag der Potentialsterme für kleine Dichten dominiert. Dabei stehen die direkten Terme des kor-

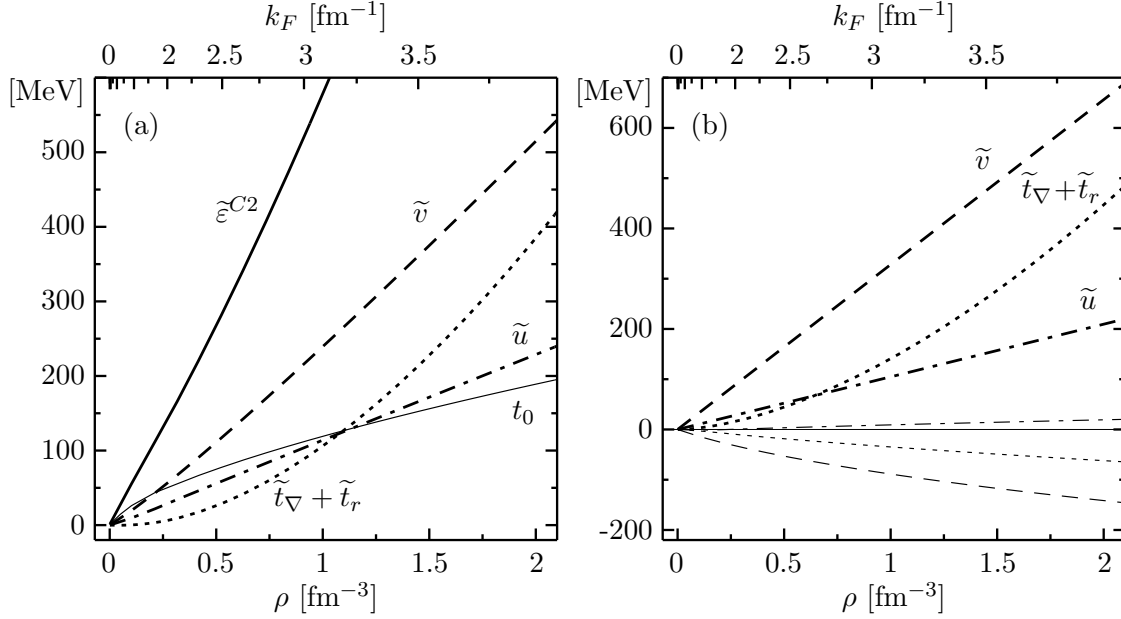


Abbildung 3.8 · Einzelbeiträge zum Energieerwartungswert für Neutronenmaterie in Abhängigkeit von der Dichte  $\rho$  für den materieoptimalen Korrelator  $V$ . (a) Dargestellt sind kinetische Energie  $t_0$  (—), korreliertes Potential  $\tilde{v}$  (---), lokaler Teil der korrelierten kinetischen Energie  $\tilde{u}$  (-.-.-), effektive Massenkorekturen  $\tilde{t}_\nabla + \tilde{t}_r$  (.....) und Gesamtenergie  $\tilde{\epsilon}^{C2}$  (—). (b) Vergleich zwischen direkten Termen (dicke Linien) und Austauschtermen (dünne Linien) für korreliertes Potential, Lokalteil der kinetischen Energie und die effektiven Massenkorekturen.

relierten Potentials und der lokale Beitrag der korrelierten kinetischen Energie etwa im Verhältnis 3 : 1. Interessant ist, daß sich das Vorzeichen des Austauschbeitrages für die beiden lokalen Terme unterscheidet, obwohl die direkten Beiträge gleiches Vorzeichen haben. Hier wird deutlich, daß die Form der Radialabhängigkeit für den Austauschbeitrag mit entscheidend ist, während in den direkten Term nur das Integral eingeht. Drittens erweist sich der Beitrag der effektiven Massenkorrektur bei höheren Dichten als ausschlaggebend; bei  $\rho \approx 5.5 \text{ fm}^{-3}$  übersteigt er den Beitrag der lokalen Terme und dominiert die Dichteabhängigkeit der Energie.

## 3.2 Homework-1: Jenseits der Zweiteilchennäherung

### 3.2.1 Dreiteilchenbeiträge

Die Qualität der Zweiteilchennäherung kann erst durch Berechnung oder zumindest Abschätzung der Terme der nächsten Ordnung quantitativ beurteilt werden. Zu diesem Zweck werden die Erwartungswerte der lokalen Operatoren der dritten Clusterordnung betrachtet. Wie in Abschnitt 2.1.3 dargestellt, liefert die dritte Ordnung der Clusterentwicklung zum einen lokale Dreiteilchenoperatoren, deren Erwartungswert (direkter Term) proportional zu  $k_F^6$  ist, und zum anderen effektive Massenkorekturen, deren Erwartungswert in führender Ordnung mit  $k_F^8$  wächst. Allerdings sind die effektiven Massenterme in Dreiteilchenordnung zu komplex, um mit vertretbarem Aufwand numerisch behandelt zu werden, daher werden nur die lokalen Terme berücksichtigt. In der Sprechweise der Entwicklung in Potenzen des Fermiimpulses (2.41) wird nach der Ord-

nung  $k_F^6$  abgebrochen, dies sollte bei moderaten Dichten eine ausreichende Näherung sein. Diese Näherung wird mit dem Symbol „C3\*“ gekennzeichnet, es gilt

$$\tilde{\varepsilon}^{C3*} = \tilde{\varepsilon}^{C2} + \tilde{v}^{[3]} + \tilde{u}^{[3]}. \quad (3.3)$$

Die Dreiteilchenbeiträge werden im Sinne einer Störungsrechnung als Korrektur der Ergebnisse der Zweiteilchennäherung behandelt. Das heißt, die optimalen Korrelatoren werden bezüglich der Zweiteilchennäherung bestimmt und die Beiträge der dritten Ordnung mit diesen Korrelatoren berechnet. Der Materieerwartungswert eines lokalen Dreiteilchenpotentials setzt sich aus einem direkten Term, Termen mit einfachem Austausch und Termen mit doppeltem Austausch zusammen. Die einzelnen Terme sind durch die Gleichungen (2.38) gegeben.

Zur Darstellung der dreiteilchenkorrelierten Operatoren bzw. der Operatoren der irreduziblen Dreiteilchenbeiträge wurden zwei Methoden entwickelt: Erstens die verallgemeinerte Dreiteilchentransformation (siehe Abschnitt 1.4.3), die auf einer einfachen Verallgemeinerung der Zweiteilchen-Koordinatentransformation basiert. Zweitens die Produktnäherung (Abschnitt 1.3.5), die aus einer Partialsummation der Potenzreihenentwicklung des Korrelationsoperators hervorgeht. Beide Ansätze unterscheiden sich bezüglich der Anwendung lediglich in der Form der Koordinatentransformation, die zur Bestimmung der korrelierten Operatoren benötigt wird.

Die Berechnung des Dreiteilchenbeitrags zum korrelierten Potential ist vergleichsweise einfach. Der irreduzible Dreiteilchenbeitrag des Potentials in Ortsdarstellung ist durch

$$\tilde{v}^{[3]}(X) = v_3[\mathcal{X}_+(X)] - \tilde{v}_2(X) \quad (3.4)$$

definiert. Hier wird wie in Abschnitt 1.4 der Vielteilchen-Koordinatenvektor  $X = (\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3)^T$  für die drei Einteilchenkoordinaten eingeführt,  $\mathcal{X}_+(X)$  bezeichnet die entsprechende Transformationsfunktion. Das unkorrelierte Dreiteilchenpotential ist die Summe der Zweiteilchenpotentiale aller Paare

$$v_3(X) = v(r_{12}) + v(r_{13}) + v(r_{23}) \quad (3.5)$$

und das zweiteilchenkorrelierte Potential ist durch

$$\tilde{v}_2(X) = v[R_+(r_{12})] + v[R_+(r_{13})] + v[R_+(r_{23})] \quad (3.6)$$

gegeben. Die in den Erwartungswerten (2.38) für den Dreiteilchenbeitrag des Potentials auftretenden neundimensionalen Integrale lassen sich durch Ausnutzung der Translationsinvarianz auf sechsdimensionale Integrale reduzieren (o.B.d.A.  $\vec{x}_1 = 0$ ). Diese können mit Monte-Carlo-Verfahren berechnet werden, hier wird die Routine „VEGAS“ aus [PrTe92] verwendet. Die Zahl der Samplingpunkte liegt in der Größenordnung  $10^6$  bis  $10^7$ , die statistischen Fehler der Resultate für das Potential liegen damit deutlich unter einem Prozent.

Die Berechnung des lokalen Dreiteilchenbeitrags der korrelierten kinetischen Energie gestaltet sich dagegen um einiges komplexer, formal gilt

$$\tilde{u}^{[3]}(X) = \tilde{u}_3(X) - \tilde{u}_2(X). \quad (3.7)$$

Der Potentialbeitrag der dreiteilchenkorrelierten kinetischen Energie wurde in Abschnitt 1.4.2 abgeleitet. Mit Gleichung (1.74) gilt

$$\tilde{u}_3(X) = -\frac{1}{2m} \left[ \frac{1}{\mathcal{D}_-(X')} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial X_i'^2} \mathcal{D}_-(X') \right]_{X'=\mathcal{X}_+(X)}, \quad (3.8)$$

dabei ist  $\mathcal{D}_-(X)$  die Jacobideterminante der Transformation  $\mathcal{X}_-(X)$ . Das zweiteilchenkorrelierte kinetische Potential im Dreiteilchensystem ist

$$\tilde{u}_2(X) = \tilde{u}(r_{12}) + \tilde{u}(r_{13}) + \tilde{u}(r_{23}). \quad (3.9)$$

Bei Berechnung der Integrale (2.38) für den kinetischen Dreiteilchenbeitrag erweist es sich als sinnvoll, die Integrationsvariable zu transformieren. Statt Integration über die Koordinate  $X$  wird die Integration über  $X' = \mathcal{X}_+(X)$  ausgeführt

$$\begin{aligned} \int d^9X \tilde{u}^{[3]}(X) f(X) &= \int d^9X' \mathcal{D}_-^2(X') \tilde{u}^{[3]}[\mathcal{X}_-(X')] f[\mathcal{X}_-(X')] \\ &= \int d^9X' \tilde{u}^{[3]}(X') f[\mathcal{X}_-(X')], \end{aligned} \quad (3.10)$$

dabei steht  $f(X)$  für die Besselfunktionen der Austauschsterme und

$$\tilde{u}^{[3]}(X') = -\frac{1}{2m} \mathcal{D}_-(X') \sum_i \frac{\partial^2}{\partial X_i'^2} \mathcal{D}_-(X') - \mathcal{D}_-^2(X') \tilde{u}_2[\mathcal{X}_-(X')]. \quad (3.11)$$

Die Auswertung des kinetischen Dreiteilchenpotentials vereinfacht sich damit erheblich. Insbesondere ist nur noch die Transformation  $\mathcal{X}_-(X)$  notwendig und nicht zusätzlich die inverse Transformation, wie es im ursprünglichen Ausdruck der Fall war. Nur so läßt sich auch der kinetische Beitrag für die verallgemeinerte Koordinatentransformation berechnen, da hier die Inverse nur näherungsweise bekannt ist (vgl. Abschnitt 1.4.3).

Die Berechnung des kinetischen Potentials ist problematisch, da die zweifache Ableitung des Metrikfaktors numerisch berechnet werden muß. Im Rahmen der Monte-Carlo-Integration lassen sich in vertretbarer Rechenzeit die relativen statistischen Fehler nur auf ca 10% reduzieren. Das ist jedoch akzeptabel, da die Potentialbeiträge der kinetischen Energie rund eine Größenordnung unter denen des Potentials liegen.

Die Berechnung der lokalen Dreiteilchenbeiträge wird für die beiden genannten Formulierungen der Mehrteilchenkorrelationen mit dem zweiteilchenoptimalen Korrelator  $I$  (Parameter nach Tabelle 3.1) und dem materieoptimalen Korrelator  $V$  (Parameter nach Tabelle 3.2) durchgeführt. Die Abbildung 3.9 zeigt die Energien in Zweiteilchennäherung unter Berücksichtigung der Dreiteilchenbeiträge des Potentials bzw. unter Einbeziehung aller lokalen Dreiteilchenbeiträge.

Generell wird deutlich, daß die Überbindung, die in der Zweiteilchennäherung auftritt, durch Hinzunahme der nächsten Ordnung im Fermiimpuls — d.h. der lokalen Terme der Dreiteilchenordnung — kompensiert wird. In jedem Fall liegen die Ergebnisse mit den Dreiteilchenbeiträgen über den Vergleichsrechnungen, was im Rahmen des Ritzschen Variationsprinzips auch zu erwarten ist. In Anbetracht der Einfachheit der Versuchswellenfunktion, die vermittels der Korrelationsfunktion lediglich drei freie Parameter besitzt und der Tatsache, daß die Dreiteilchenbeiträge im störungstheoretischen Sinne hinzugefügt wurden, sind die Resultate recht überzeugend. Es ist zu erwarten, daß die Energie durch eine neuerliche Minimierung in Dreiteilchennäherung weiter abgesenkt werden kann, so daß die Vergleichsdaten noch besser reproduziert werden.

Die beiden verwendeten Näherungen zur Berechnung der Dreiteilchenbeiträge — d.h. die Produktnäherung und die verallgemeinerte Koordinatentransformation — liefern Resultate, die sich systematisch unterscheiden. Die verallgemeinerte Koordinatentransformation erzeugt einen Dreiteilchenbeitrag, der um ein Drittel bis die Hälfte kleiner ist als die Produktnäherung. Dieses Verhalten ist mit den anschaulichen Überlegungen, die

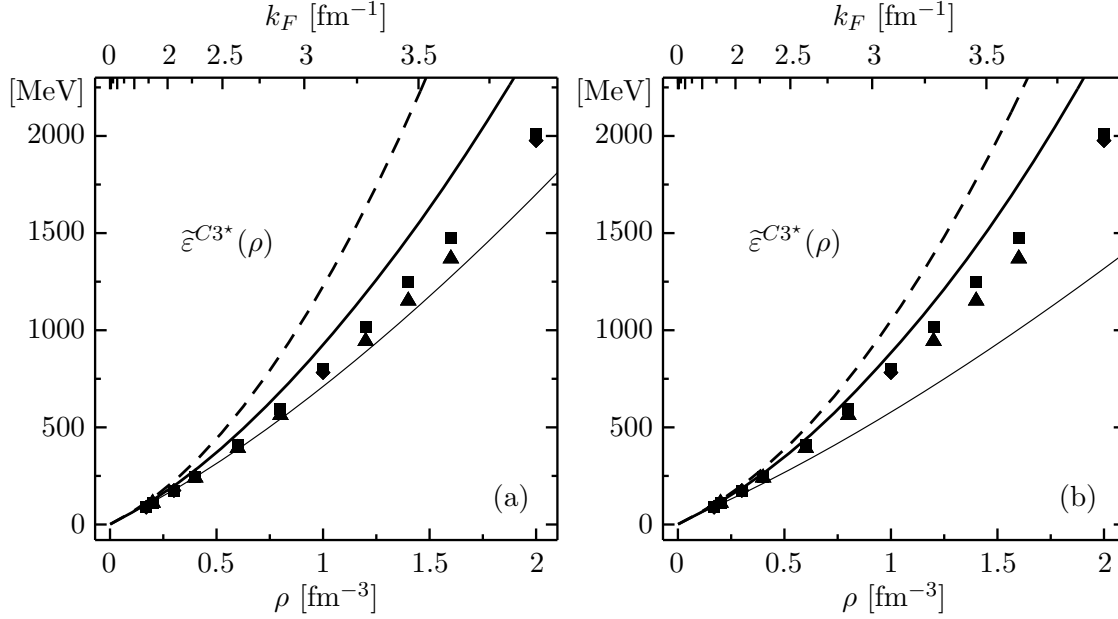


Abbildung 3.9 · Zustandsgleichung in Dreiteilchennäherung unter Verwendung des zweiteilchenoptimalen Korrelators  $I$  (a) bzw. des materieoptimalen Korrelators  $V$  (b). Dargestellt ist das Ergebnis der Zweiteilchennäherung (—) und die Resultate bei Hinzunahme der lokalen Dreiteilchenbeiträge beschrieben durch die Produktapproximation (---) und die verallgemeinerte Koordinatentransformation (—). Die Symbole bezeichnen die Vergleichsrechnungen (siehe Abbildung 3.3). Der Kleinheitsparameter  $\kappa$  erreicht den Wert 0.3 für den zweiteilchen- bzw. materieoptimalen Korrelator bei  $\rho \approx 0.22 \text{ fm}^{-3}$  bzw.  $0.34 \text{ fm}^{-3}$ .

bei der Untersuchung der beiden Näherungen in Abschnitt 1.4.4 angestellt wurden, zu erklären. Generell beruht die in der Dreiteilchenordnung auftretende Abstoßung auf dem Umstand, daß einzelne Paare eines Tripels in bestimmten Konfigurationen näher zusammengedrückt werden als im Falle der Zweiteilchenkorrelationen. Für rein abstoßende Potentiale ist damit zwangsläufig eine Erhöhung der Energie verbunden. Zum anderen erzeugt die Transformation zusätzliche Krümmung, die sich in einem erhöhten Beitrag der kinetischen Energie – dem Potentialteil der kinetischen Energie – widerspiegelt. Wie sich im folgenden zeigen wird, ist dies jedoch der kleinere Effekt.

Die aus der Produktapproximation erwachsende Koordinatentransformation schiebt in bestimmten Konfigurationen Paare eines Teilchentripels unphysikalisch nah zusammen. Bei Hard-Core-Potentialen können Teilchen sogar in den unendlichen Core hineingeschoben werden, was diese Näherung unbrauchbar macht. Bei der verallgemeinerten Koordinatentransformation ist dieses Verhalten ausgeschlossen. Zwar werden Teilchen auch hier gegenüber der Zweiteilchennäherung zusammengeschoben, aber niemals in den Core hinein. Im Falle von rein abstoßenden Soft-Core-Potentialen macht sich das „in den Core Schieben“ der Produktapproximation durch einen überhöhten Beitrag des Potentials im Vergleich zur verallgemeinerten Koordinatentransformation bemerkbar. Aus diesem Grund ist die Produktapproximation dem physikalischen Sachverhalt nicht angemessen und die verallgemeinerte Koordinatentransformation ist vorzuziehen.

Zum Zwecke einer genaueren Analyse sind in Abbildung 3.10 die Dreiteilchenbeiträge von Potential und lokalem Anteil der kinetischen Energie separat aufgetragen. Die Tabelle 3.4 zeigt die numerischen Einzelbeiträge für einige ausgewählte Dichten. Der Dreiteilchenbeitrag zum korrelierten Potential ist nur relativ schwach von den bei-

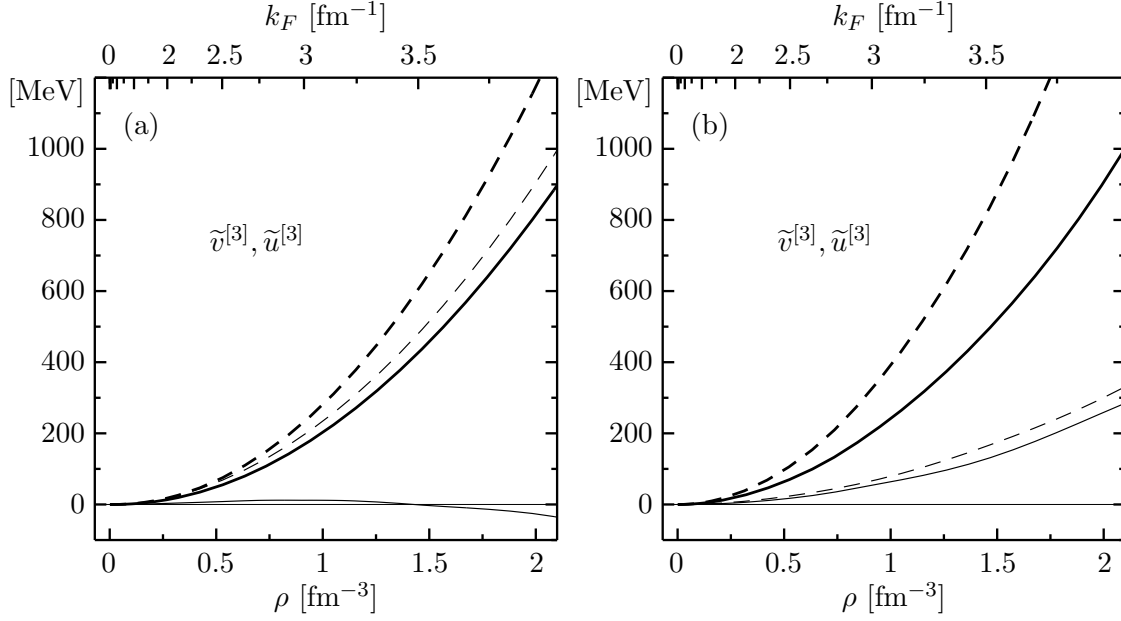


Abbildung 3.10 · Lokale Dreiteilchenbeiträge zur Neutronenmaterieenergie in Produkt-näherung (---) oder mit der verallgemeinerten Koordinatentransformation (—) berechnet. Die dünnen Kurven (---) bzw. (—) zeigen den lokalen Dreiteilchenbeitrag der kinetischen Energie  $\tilde{u}^{[3]}$ , während die dicken Kurven (---) bzw. (—) den Dreiteilchenbeitrag des Potentials  $\tilde{v}^{[3]}$  bezeichnen. Verwendet wird der zweiteilchenoptimale Korrelator  $I$  (a) bzw. der materieoptimale Korrelator  $V$  (b).

$\rho$ [fm <sup>-3</sup> ]	$\kappa$	$\tilde{\varepsilon}^{C2}$ [MeV]	Produkt-näherung			verallgem. Trafo.		
			$\tilde{v}^{[3]}$ [MeV]	$\tilde{u}^{[3]}$ [MeV]	$\tilde{\varepsilon}^{C3*}$ [MeV]	$\tilde{v}^{[3]}$ [MeV]	$\tilde{u}^{[3]}$ [MeV]	$\tilde{\varepsilon}^{C3*}$ [MeV]
0.1	0.08	54.3	3.7	0.9	58.9	2.7	0.5	57.5
0.2	0.16	104.6	15.5	3.7	123.8	10.9	2.3	117.8
0.5	0.40	267.7	96.8	21.7	386.1	63.9	15.6	347.2
1.0	0.81	578.4	391.0	79.2	1048.6	241.4	64.0	883.8
1.5	1.21	933.1	876.1	174.9	1981.1	518.8	137.9	1586.7
2.0	1.61	1317.5	1573.4	300.4	3191.2	905.9	259.0	2483.4

Tabelle 3.4 · Dreiteilchenbeiträge zur Energie pro Teilchen für den materieoptimalen Korrelator  $V$  bei ausgewählten Dichten berechnet mit der Produkt-näherung und der verallgemeinerten Transformation.  $\kappa = \rho V_C$  bezeichnet den Kleinheitsparameter.

den verwendeten Korrelationsfunktionen und der verwendeten Dreiteilchennäherung abhängig. Hier bestätigt sich, was bereits anhand der Gesamtenergien beobachtet wurde: Die Produkt-näherung liefert systematisch höhere Dreiteilchenbeiträge als die verallgemeinerte Koordinatentransformation. Ein anderes Bild ergibt sich bei den lokalen Dreiteilchenbeiträgen der korrelierten kinetischen Energie, sie hängen deutlich von den verwendeten Korrelationsfunktionen und Näherungen ab. Im Falle des materieoptima-

len Korrelators ist der kinetische Beitrag in beiden Näherungen um circa ein Viertel kleiner als der Potentialbeitrag, verhält sich sonst aber ganz analog. Das Verhalten für den zweiteilchenoptimalen Korrelator stellt sich dagegen ganz anders dar. In der Produktnäherung ergibt sich ein kinetischer Beitrag, der von der gleichen Größenordnung wie der Potentialbeitrag ist. Die verallgemeinerte Koordinatentransformation liefert dagegen einen nahezu verschwindenden kinetischen Beitrag, der auf der gegenseitigen Kompensation von direktem und Austauschtermen beruht.

Einen quantitativen Eindruck von der Bedeutung der Dreiteilchenbeiträge vermittelt Tabelle 3.4. Für die verallgemeinerte Koordinatentransformation überschreitet der relative Anteil des Dreiteilchenbeitrags an der Gesamtenergie erst bei Dichten größer als  $\rho = 0.2 \text{ fm}^{-3}$  die Grenze von 10%, unterhalb dieser Dichten ist er für die hier angestrebten Genauigkeiten nicht relevant. Der Kleinheitsparameter  $\kappa = \rho V_C$  ist bei diesen Dichten in der Größenordnung von 0.15.

Für alle folgenden Untersuchungen wird der Kleinheitsparameter als grobes Maß für die Bedeutung der Dreiteilchenkorrekturen bzw. die Gültigkeit der Zweiteilchennäherung verwendet. Als empirische Grenze für die uneingeschränkte Anwendbarkeit der Zweiteilchennäherung wird ein Kleinheitsparameter von  $\kappa \approx 0.3$  angesehen. Jenseits dieser Grenze ist eine Untersuchung der Dreiteilchenbeiträge oder eine effektive Berücksichtigung der höheren Ordnungen der Clusterentwicklung angebracht. Das Überschreiten dieses Kleinheitsparameters deutet noch nicht automatisch auf ein Versagen der Zweiteilchennäherung hin, es zeigt lediglich, daß Vorsicht geboten ist.

### 3.2.2 Dichteabhängige Korrelatoren

Die Berechnung der Dreiteilchenordnung in den diskutierten Näherungen bietet zwar eine „parameterfreie“ Beschreibung der Effekte jenseits der Zweiteilchennäherung, jedoch ist sie mit einem immensen Mehraufwand verbunden. Möchte man die analytische Einfachheit der Zweiteilchennäherung nicht aufgeben, so bietet sich die Verwendung von dichteabhängigen Korrelatoren, wie sie in Abschnitt 2.1.4 beschrieben wurden, an. Die dimensionsbehafteten Parameter  $\alpha$  und  $\beta$  des Korrelators (3.2) werden mit einer von der Dichte  $\rho$  abhängigen Funktion  $\xi(\rho)$  skaliert

$$R_+(r, \rho) = r + \alpha \xi(\rho) (r/[\beta \xi(\rho)])^\eta \exp[-\exp(r/[\beta \xi(\rho)])]. \quad (3.12)$$

Ein einfacher Ansatz für diesen Skalierungsfunktion ist nach (2.47)

$$\xi(\rho) = 1 - (\gamma \rho)^{1/3}. \quad (3.13)$$

$\gamma$  ist der einzige freie Parameter, der die Dichteabhängigkeit bestimmt. Er ist durch Anpassung an UCOM-Rechnungen, die höhere Ordnungen der Clusterentwicklung berücksichtigen, oder auf Basis anderer Methoden der Vielteilchenphysik zu bestimmen. Die Berechnung der Erwartungswerte des korrelierten Hamiltonoperators in Zweiteilchennäherung (2.1) werden durch die Abhängigkeit des Korrelators von der Dichte nicht weiter erschwert. Die auftretenden Integrale im direkten Terme — wie z.B. (2.21) — sind lediglich wie die Austauschtermine für jeden Fermiimpuls separat zu berechnen. Die Zustandsgleichung mit dichteabhängigem Korrelator in Zweiteilchennäherung wird zur Unterscheidung von der zustandsunabhängigen Rechnung mit  $\tilde{\varepsilon}^{C2\rho}$  bezeichnet.

Als Ausgangspunkt wird der materieoptimale Korrelator  $V$  mit den Parametern nach Tabelle 3.2 verwendet. Der zusätzliche Parameter  $\gamma$  der Dichteabhängigkeit wird durch



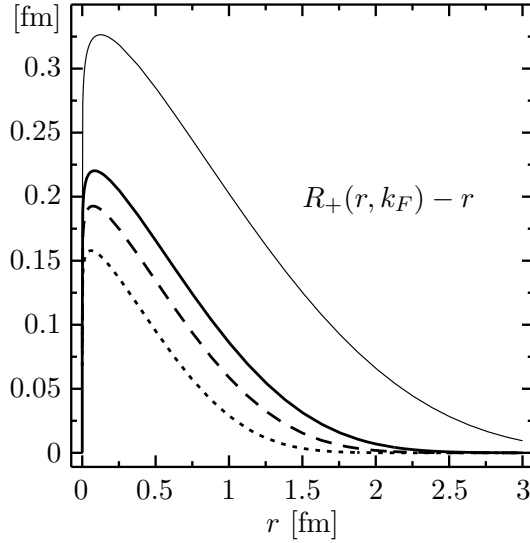


Abbildung 3.11 · Dichteabhängige materieoptimale Korrelationsfunktionen zu den Dichten  $\rho = 0.5 \text{ fm}^{-3}$  (—),  $1.0 \text{ fm}^{-3}$  (---) und  $2.0 \text{ fm}^{-3}$  (.....) und der herkömmliche materieoptimale Korrelator (—).

Anpassung an das Resultat einer Monte-Carlo-Rechnung, die im Rahmen der statistischen Fehler als exakt gilt, bestimmt. Verwendet wird das Ergebnis von J.G. Zabolitzky [Zabo77], für den Parameter  $\gamma$  ergibt sich

$$\rho = 1.0 \text{ fm}^{-3}, \quad \varepsilon_{\text{MC}} = 782 \text{ MeV} \quad \Rightarrow \quad \gamma = 0.0689 \text{ fm}^3. \quad (3.14)$$

Bei den relevanten Dichten von bis zu  $2.0 \text{ fm}^{-3}$  bewirkt diese Dichteabhängigkeit eine Unterdrückung der Korrelatorparameter um mehr als 50%. Das Korrelationsvolumen  $V_C$ , das proportional zur dritten Potenz der Skalierungsfunktion  $\xi(\rho)$  ist, wird bei  $\rho = 2.0 \text{ fm}^{-3}$  auf ein Zehntel des Wertes des entsprechenden dichteunabhängigen Korrelators reduziert. Die Dichteabhängigkeit wirkt sich also sehr deutlich auf den Korrelator aus. Die Abbildung 3.11 zeigt die Korrelationsfunktionen für die Dichten  $\rho = 0.5, 1.0$  und  $2.0 \text{ fm}^{-3}$  und den ursprünglichen dichteunabhängigen Korrelator — oder mit anderen Worten den dichteabhängigen Korrelator bei  $\rho = 0$ .

Die Abbildung 3.12 zeigt die mit dieser Dichteabhängigkeit berechnete Zustandsgleichung im relevanten Dichteintervall. Die Übereinstimmung mit den Vergleichsresultaten ist ausgesprochen überzeugend. Die Ergebnisse liegen durchweg innerhalb der Diskrepanzen zwischen den Resultaten der übrigen Methoden. In Anbetracht der Komplexität der zum Vergleich herangezogenen Rechnungen, wie z.B. Monte-Carlo oder Fermi-Hypernetted-Chain-Rechnungen, ist die Qualität der Ergebnisse überraschend.

An dieser Stelle seien nochmals die konzeptionellen Grundlagen herausgestellt. Die Methode der unitären Korrelatoren mit Dichteabhängigkeit liefert eine einparametrische Kurvenschar für die Zustandsgleichung, die auf einfachen physikalischen Konzepten beruht: unitärer Korrelationsoperator, korrelierte Operatoren, Ritzsches Variationsprinzip zur Bestimmung des dichteunabhängigen Korrelators. Der Parameter  $\gamma$  der Dichteabhängigkeit ist in diesem Bild nicht festgelegt und muß im „schlimmsten“ Fall durch „exakte“ Resultate anderer Methoden bestimmt werden. Selbst in dieser sehr skeptischen Sicht liefert die Methode der unitären Korrelatoren eine äußerst mächtige, physikalisch fundierte Anpassungsprozedur, die mit lediglich einem Parameter hervorragende Resultate liefert.

Man ist jedoch nicht auf die Fixierung der Dichteabhängigkeit durch Vergleich mit einem Energiewert einer anderen Methode angewiesen. Man kann ebenso das Ergebnis der Dreiteilchennäherung heranziehen. Dazu müßte eigentlich ein in Dreiteilchennäherung



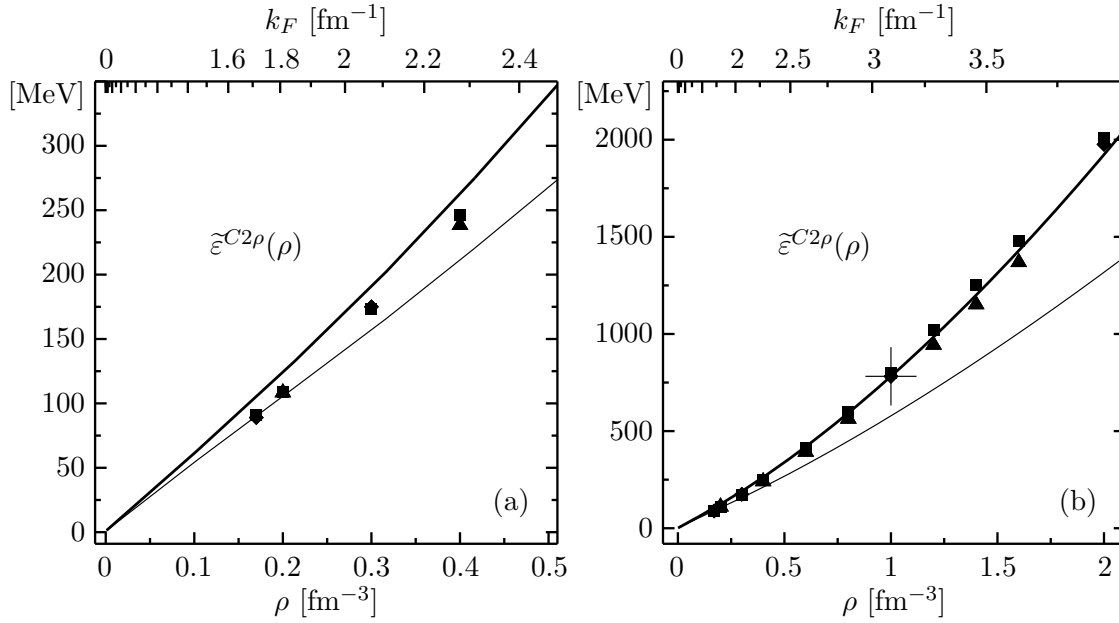


Abbildung 3.12 · Zustandsgleichung für Neutronenmaterie mit materieoptimalem Korrelator  $V$  in Zweiteilchennäherung (—) und in Zweiteilchennäherung mit dichteabhängigem Korrelator mit Skalierungsfunktion  $\xi(\rho) = 1 - (\gamma \rho)^{1/3}$  (---) angepaßt an ein Ergebnis einer Monte Carlo-Rechnung [Zabo77] für  $\rho = 1.0 \text{ fm}^{-3}$  (markiert durch das Kreuz). Die Symbole bezeichnen Vergleichsergebnisse analog Abbildung 3.3.

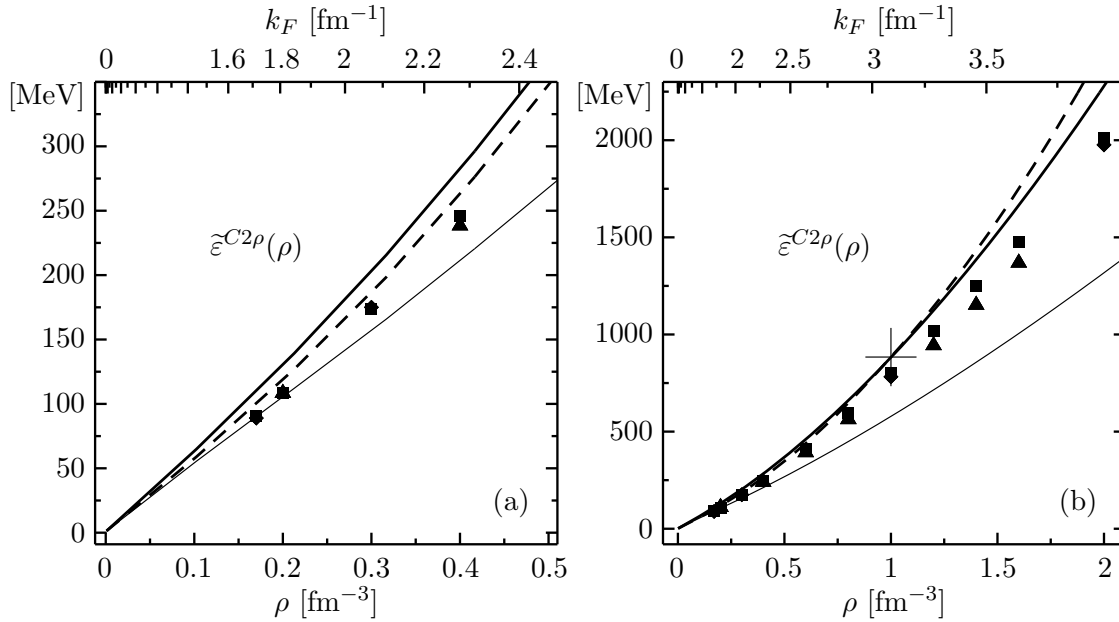


Abbildung 3.13 · Zustandsgleichung für Neutronenmaterie wie in Abbildung 3.12 jedoch angepaßt an das Resultat der Dreiteilchennäherung (---) mit der verallgemeinerten Koordinatentransformation mit materieoptimalem Korrelator für  $\rho = 1.0 \text{ fm}^{-3}$  (markiert durch das Kreuz).

optimierter Korrelator verwendet werden, da dies jedoch sehr großem numerischen Aufwand verbunden ist, soll hier darauf verzichtet werden. Als Beispiel wird der Parameter  $\gamma$  an einer Energie bei gegebener Dichte in Dreiteilchennäherung mit verallgemeinerter Koordinatentransformation und materieoptimalem Korrelator  $V$  (siehe Tabelle 3.4) fixiert:

$$\rho = 1.0 \text{ fm}^{-3}, \quad \tilde{\varepsilon}^{C3*} = 883.8 \text{ MeV} \quad \Rightarrow \quad \gamma = 0.1190 \text{ fm}^3. \quad (3.15)$$

Die Abbildung 3.13 zeigt den Vergleich des so definierten dichteabhängigen Korrelators mit dem Ergebnis der Dreiteilchenrechnung aus dem vorangehenden Abschnitt (vergl. Abbildung 3.9). Die beiden Kurven stimmen gut überein, die leichte systematische Differenz deutet darauf hin, daß die Beiträge der höheren Potenzen in  $k_F$  im Falle des dichteabhängigen Korrelators schwächer gewichtet sind, als in der Dreiteilchennäherung. Diese leichte Abweichung läßt sich durch Modifikation der funktionalen Form der Dichteabhängigkeit ausgleichen. Führt man als weiteren Parameter die Potenzordnung des Fermiimpulses ein, so läßt sich leicht ein optimaler Fit der gesamten Kurve erreichen. Darauf soll hier jedoch verzichtet werden.

### 3.2.3 Dreiteilchen-Kontaktwechselwirkung

Neben der Dichteabhängigkeit kann eine Dreiteilchen-Kontaktwechselwirkung als effektive Korrektur zur Zweiteilchennäherung in Betracht gezogen werden. Wie in Abschnitt 2.1.5 dargestellt, wird der Effekt der höheren Ordnungen der Clusterentwicklung durch einen zusätzlichen Dreiteilchen-Wechselwirkungsterm der Form

$$v_\delta(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3) = \Gamma \delta(r_{12})\delta(r_{13})\delta(r_{23}) \quad (3.16)$$

mit freiem Stärkeparameter  $\Gamma$  simuliert. Die Energie mit Dreiteilchen-Kontaktwechselwirkung setzt sich aus der Energie in Zweiteilchennäherung und dem Erwartungswert der Kontaktwechselwirkung zusammen

$$\tilde{\varepsilon}^{C2\delta} = \tilde{\varepsilon}^{C2} + v_\delta. \quad (3.17)$$

Der Stärkeparameter ist wie im Falle der dichteabhängigen Korrelatoren anhand einer Abschätzung der höheren Ordnungen der Clusterentwicklung oder anhand von Resultaten „exakter“ Methoden zu bestimmen. Zunächst wird das Resultat der Monte-Carlo-Rechnung von J.G. Zabolitzky [Zabo77] für die Dichte  $\rho = 1.0 \text{ fm}^{-3}$  verwendet, um  $\Gamma$  auf Basis der Zweiteilchennäherung mit dem materieoptimalen Korrelator  $V$  festzulegen:

$$\rho = 1.0 \text{ fm}^{-3}, \quad \varepsilon_{\text{MC}} = 782 \text{ MeV} \quad \Rightarrow \quad \Gamma = 1630 \text{ MeV fm}^3. \quad (3.18)$$

Mit diesem Parameterwert wird die Zustandsgleichung für das relevante Dichteintervall berechnet, die Abbildung 3.14 zeigt das Resultat im Vergleich zu den Referenzrechnungen. Die Übereinstimmung ist wie im Falle der dichteabhängigen Korrelatoren sehr überzeugend, die Energie liegt durchweg in dem durch die Streuung der Referenzdaten gegebenen Bereich. Bei niedrigen Dichten sind die Resultate sogar besser als die des dichteabhängigen Korrelators. Das ist damit zu erklären, daß die Dreiteilchenwechselwirkung nur einen zusätzlichen  $k_F^6$ -Term liefert und keine weiteren Terme niedrigerer Potenzen wie im Falle der dichteabhängigen Korrelatoren, die sich bei den niedrigen Dichten nachteilig bemerkbar machen.

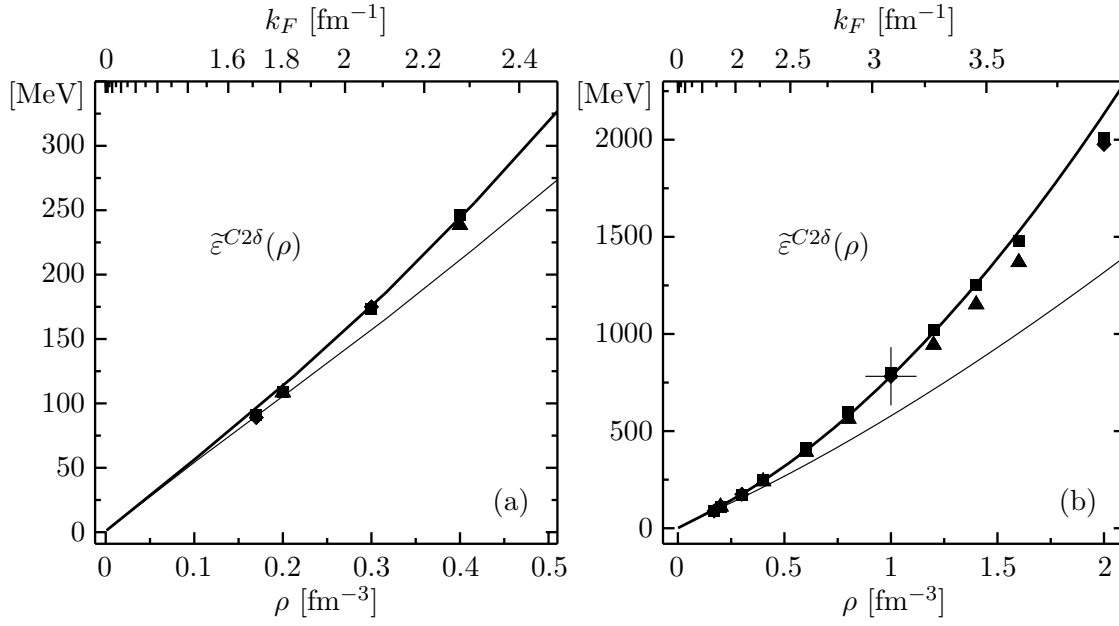


Abbildung 3.14 · Zustandsgleichung für Neutronenmaterie mit materieoptimalem Korrelator  $V$  in Zweiteilchennäherung (—) unter Einbeziehung einer effektiven Dreiteilchen-Kontaktwechselwirkung (—). Die Stärke der Dreiteilchenwechselwirkung ist mit Hilfe des Ergebnisses einer Monte Carlo-Rechnung [Zabo77] für  $\rho = 1.0 \text{ fm}^{-3}$  (markiert durch das Kreuz) festgelegt. Die Symbole bezeichnen Vergleichsergebnisse analog Abbildung 3.3.

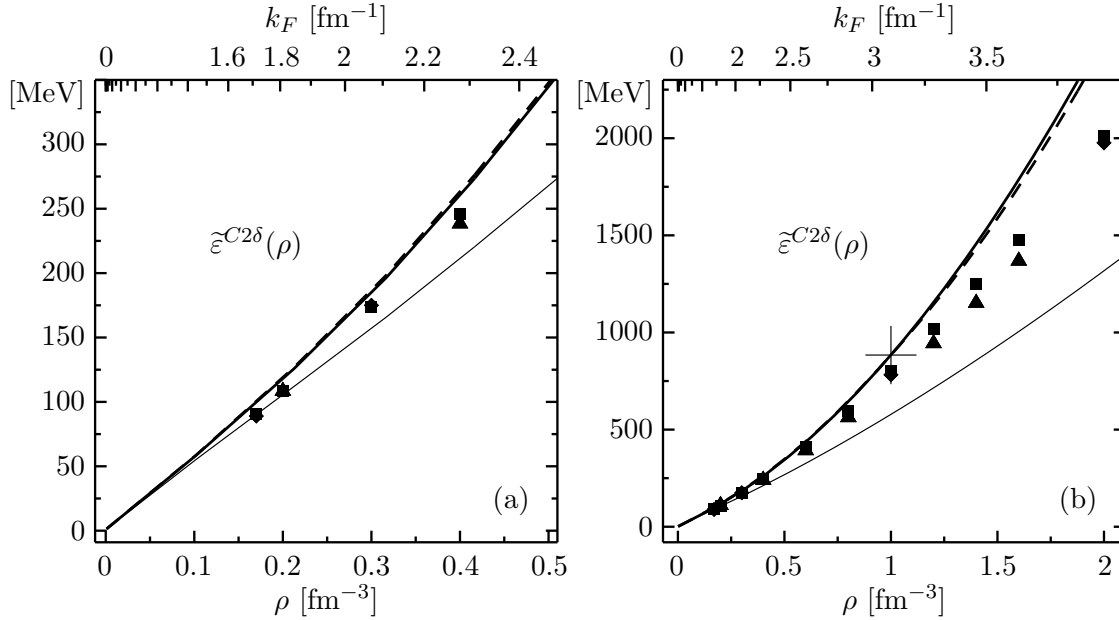


Abbildung 3.15 · Zustandsgleichung für Neutronenmaterie wie in Abbildung 3.14. Die Stärke der Dreiteilchen-Kontaktwechselwirkung ist an das Resultat der Dreiteilchennäherung (—) mit der verallgemeinerten Koordinatentransformation mit materieoptimalem Korrelator für  $\rho = 1.0 \text{ fm}^{-3}$  angepaßt (markiert durch das Kreuz).

Der Vollständigkeit halber wird zur Anpassung der Dreiteilchen-Kontaktwechselwirkung auch das Resultat der Dreiteilchennäherung mit verallgemeinerten Koordinatentransformation herangezogen (siehe Tabelle 3.4). Auf Basis des materieoptimalen Korrelators  $V$  ergibt sich für den Stärkeparameter:

$$\rho = 1.0 \text{ fm}^{-3}, \quad \tilde{\varepsilon}^{C3*} = 883.8 \text{ MeV} \quad \Rightarrow \quad \Gamma = 2444 \text{ MeV fm}^3. \quad (3.19)$$

Die Abbildung 3.15 zeigt die Zustandsgleichung im untersuchten Dichteintervall. Die Dreiteilchen-Kontaktwechselwirkung reproduziert das Verhalten der genäherten Dreiteilchenordnung der Clusterentwicklung praktisch exakt. Das ist darauf zurückzuführen, daß die direkten Terme der lokalen Beiträge der Dreiteilchenordnung ebenfalls mit  $k_F^6$  anwachsen, die minimale Abweichung ist auf die kleinen Beiträge der Austauschsterme mit anderer  $k_F$ -Abhängigkeit zurückzuführen.

Alternativ zur Anpassung der Energie bei einer gegebenen Dichte kann der Stärkeparameter mit Hilfe von (2.54) auch direkt aus dem Dreiteilchenpotential bestimmt werden. Es ergibt sich ein Wert von  $\Gamma = 2435 \text{ MeV fm}^3$ , der sehr nah an dem vorangehenden Resultat liegt. Der Unterschied zur Anpassung an die Energie besteht lediglich darin, daß bei letzterem die Austauschsterme berücksichtigt werden.

Die hier festgelegten Dreiteilchenwechselwirkungen lassen sich direkt in Strukturrechnungen für endliche Systeme verwenden. Damit steht eine einfache Möglichkeit zur Verfügung, die Beiträge der höheren Ordnungen ohne die aufwendigen expliziten Rechnungen abzuschätzen. Darauf wird in einem späteren Kapitel am Beispiel kleiner  ${}^4\text{He}$ -Tröpfchen bzw. homogener  ${}^4\text{He}$ -Flüssigkeit näher eingegangen.

### 3.3 Homework-1: Dichten und Besetzungszahlen

Neben der Zustandsgleichung stellen Dichteverteilungen in Orts- und Impulsraum eine interessante Observable bei der Untersuchung von Kern- und Neutronenmaterie dar. In diesem Abschnitt wird die Anwendung der Methode der unitären Korrelatoren auf die Beschreibung der Dichten in Neutronenmaterie mit dem Homework-1-Potential demonstriert.

#### 3.3.1 Korrelierte Zweiteilchendichte

Die formalen Grundlagen der Berechnung korrelierter Dichten sind in Abschnitt 2.2.3 dargestellt und werden hier speziell mit dem materieoptimalen Korrelator  $V$  angewendet werden. Dabei wird zum einen der zustandsunabhängige Korrelator  $V$  verwendet, wie er in Abschnitt 3.1.4 abgeleitet wurde. Zum anderen wird auf die dichteabhängige Erweiterung entsprechend Abschnitt 3.2.2 mit den Parametern (3.14) zurückgegriffen. Untersucht werden die Diagonalelemente der Zweiteilchendichte in Ortsdarstellung, die Außerdiagonalen der Einteilchendichte in Ortsdarstellung und die daraus resultierenden Besetzungszahlen im Impulsraum bei einer moderaten Dichte von  $\rho = 0.2 \text{ fm}^{-3}$  ( $k_F = 1.809 \text{ fm}^{-1}$ ), die auch in Kernmaterierechnungen mit realistischen Wechselwirkungen relevant ist, und bei einer sehr hohen Dichte von  $\rho = 1.0 \text{ fm}^{-3}$  ( $k_F = 3.094 \text{ fm}^{-1}$ ), die als Extremfall zum Studium des Hochdichteverhaltens der Methode anzusehen ist.

Zuerst werden die Diagonalelemente der korrelierten Zweiteilchendichte in Ortsdarstellung unter Verwendung der Zweiteilchennäherung untersucht. Die formalen Überle-

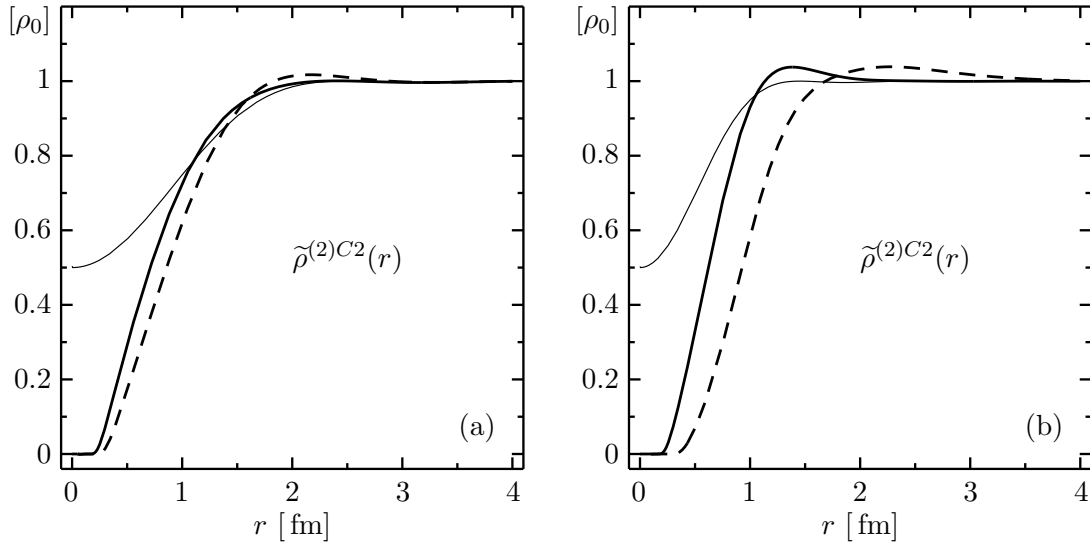


Abbildung 3.16 · Korrelierte Zweiteilchendichte für Neutronenmaterie mit zustandsunabhängigem materiell optimalen Korrelator  $V$  (---) und dem entsprechenden dichteabhängig skalierten Korrelator (—) bei einer mittleren Dichte  $\rho = 0.2 \text{ fm}^{-3}$  (a) bzw.  $\rho = 1.0 \text{ fm}^{-3}$  (b). Zum Vergleich ist die unkorrelierte Zweiteilchendichte (—) dargestellt.

gungen aus Abschnitt 2.2 ergeben die Form (2.87)

$$\tilde{\rho}^{(2)C2}(r) = \mathcal{R}_-^2(r) \left[ \rho^2 - \frac{1}{\lambda} [\rho^{(1)}(R_-(r))]^2 \right]. \quad (3.20)$$

Die Abbildung 3.16 zeigt diese korrelierte Zweiteilchendichte für die beiden gewählten Dichten, berechnet mit dem dichteunabhängigen Korrelator  $V$  bzw. mit der dichteabhängigen Erweiterung. Der Skalierungsfaktor nimmt mit den Parametern (3.14) für  $\rho = 0.2 \text{ fm}^{-3}$  den Wert  $\xi = 0.76$  und für  $\rho = 1.0 \text{ fm}^{-3}$  den Wert  $\xi = 0.59$  an.

Die in den Abbildungen ebenfalls dargestellte unkorrelierte Zweiteilchendichte zeigt für kleine Abstände eine Unterdrückung, die als *Austauschloch* bezeichnet wird. Es ist eine direkte Folge des antisymmetrischen Charakters der Wellenfunktion — das Pauliprinzip verhindert, daß sich zwei Fermionen mit sonst gleichen Quantenzahlen am selben Ort aufhalten. Die Zweiteilchendichte, die ein Maß für die Wahrscheinlichkeit, zwei Teilchen im Abstand  $r$  anzutreffen, darstellt, wird demnach für kleine Abstände unterdrückt. Da jeder Impulseigenzustand durch die Spin-Isospinentartung  $\lambda$ -fach besetzt werden kann, reduziert das Pauliprinzip die Zweiteilchendichte für  $r = 0$  um einen Faktor  $(1 - 1/\lambda)$ . Im Falle der Neutronenmaterie also auf  $1/2$ , für Kernmaterie auf  $3/4$ . Der Radius des Austauschloches hängt von der Dichte des Systems ab, genauer: er ist proportional zum inversen Fermiimpuls des Systems. Außerhalb des eigentlichen Lochs zeigen sich die sog. Friedelozillationen der Zweiteilchendichte um die mittlere Dichte  $\rho$ , sie stellen im Gegensatz zum kurzreichweiten Austauschloch ein Art langreichweitige Korrelation als Folge des fermionischen Charakters der Wellenfunktion dar. Formal ist die Gestalt und die  $k_F$ -Abhängigkeit von Austauschloch und Friedelozillationen unmittelbar durch das Quadrat der Außerdiagonalelemente der unkorrelierte Einteilchendichte bestimmt (siehe Gleichung (2.73)).

Durch Einsetzen des Korrelators werden die durch die Wechselwirkung der Teilchen induzierten Korrelationen sichtbar: Die Zweiteilchendichte wird bei kleinen Abständen weiter reduziert und es bildet sich ein *Korrelationsloch* mit einem Radius von etwa 1 fm.

Im Gegensatz zum Austauschloch wird die Dichte aufgrund der Wechselwirkungskorrelationen innerhalb des Lochs ( $r \lesssim 0.5 \text{ fm}$ ) praktisch auf Null reduziert. Der abstoßende Core des Potentials verhindert, daß sich Teilchen auf Abstände kleiner dem Coreradius annähern. Das Korrelationsloch zeigt deutlich die Signatur der unitären Transformation: Die Stärke, die bei kleinen Abständen zur Bildung des Lochs verdrängt wird, findet sich als Überhöhung bei größeren Abständen wieder. Das Volumenintegral über die Diagonalelemente der Zweiteilchendichte ist Dank der Unitarität unabhängig vom Korrelator (2.88).

Ein interessanter Punkt ist die Abhängigkeit der Größe des Korrelationslochs von der Dichte verglichen mit der Größe des Austauschlochs. Wie bereits festgestellt, skaliert der Radius des Austauschlochs mit dem inversen Fermiimpuls. Der dichteunabhängige Korrelator erzeugt ein Korrelationsloch, das im wesentlichen unabhängig von der Dichte ist. Lediglich die Abhängigkeit der unkorrelierten Zweiteilchendichte verursacht kleine Unterschiede (siehe (3.20)). Das führt dazu, daß das Korrelationsloch für  $\rho = 1.0 \text{ fm}^{-3}$  praktisch den doppelten Radius wie das Austauschloch aufweist, während beide bei  $\rho = 0.2 \text{ fm}^{-3}$  etwa die gleiche Ausdehnung zeigen. Die Einführung der dichteabhängigen Skalierung schwächt den Korrelator so weit ab, daß das Austauschloch und das Korrelationsloch für beide betrachteten Dichten etwa gleiche Radien haben. Das heißt die dichteabhängigen Korrelatoren bilden die fundamentale Dichteabhängigkeit der Reichweiteskala, die das Austauschloch demonstriert, nach. Es wird sich zeigen, daß es notwendig ist, dieses Skalenverhalten mit den Korrelatoren nachzubilden, da man andernfalls zwangsläufig zu unphysikalischen Ergebnissen kommt.

### 3.3.2 Korrelierte Einteilchendichte und Besetzungszahlen

Eine besonders intuitive Observable sind die Besetzungszahlen im Impulsraum. Im unkorrelierten Zustand sind alle Impulseigenzustände bis zum Fermiimpuls entsprechend dem Spin-Isospinentartungsgrad  $\lambda$  besetzt, das entspricht der sogenannten Fermikugel. Im korrelierten Zustand erwartet man als Effekt der Wechselwirkung die Besetzung von Impulszuständen oberhalb der Fermikante und eine entsprechende Entvölkerung der Fermikugel. Diese Impulsraum-Besetzungszahlen sind durch die Fouriertransformierte der Außerdiagonalelemente der Einteilchendichte gegeben, daher ist es notwendig, zuerst die korrelierte Einteilchendichte zu formulieren.

Mit der Diskussion in Abschnitt 2.2.4 gilt für die Außerdiagonalelemente der korrelierten Einteilchendichte entsprechend den Gleichungen (2.95ff)

$$\tilde{\rho}^{(1)C2}(r_{12}) = \rho^{(1)}(r_{12}) + \tilde{\rho}^{(1)[2]}(r_{12}) \quad (3.21)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}^{(1)[2]}(r_{12}) &= \int_V d^3x [\tilde{\rho}^{(2)C2}(\vec{x}_1, \vec{x}; \vec{x}_2, \vec{x}) - \rho^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{x}; \vec{x}_2, \vec{x})] \\ &= \int_V d^3x \tilde{\rho}^{(2)C2}(\vec{x}_1, \vec{x}; \vec{x}_2, \vec{x}) - (\rho V - 1) \rho^{(1)}(r_{12}) \end{aligned} \quad (3.22)$$

und

$$\begin{aligned} \int_V d^3x \tilde{\rho}^{(2)C2}(\vec{x}_1, \vec{x}; \vec{x}_2, \vec{x}) &= 2\pi \int_0^R \int_{-H}^H d\varrho dz \varrho \times \\ &\times \mathcal{R}_-(r_{13}) \mathcal{R}_-(r_{23}) \left[ \rho^{(1)}(\tilde{r}_{12}) \rho^{(1)}(\tilde{r}_{33}) - \frac{1}{\lambda} \rho^{(1)}(\tilde{r}_{13}) \rho^{(1)}(\tilde{r}_{32}) \right], \end{aligned} \quad (3.23)$$

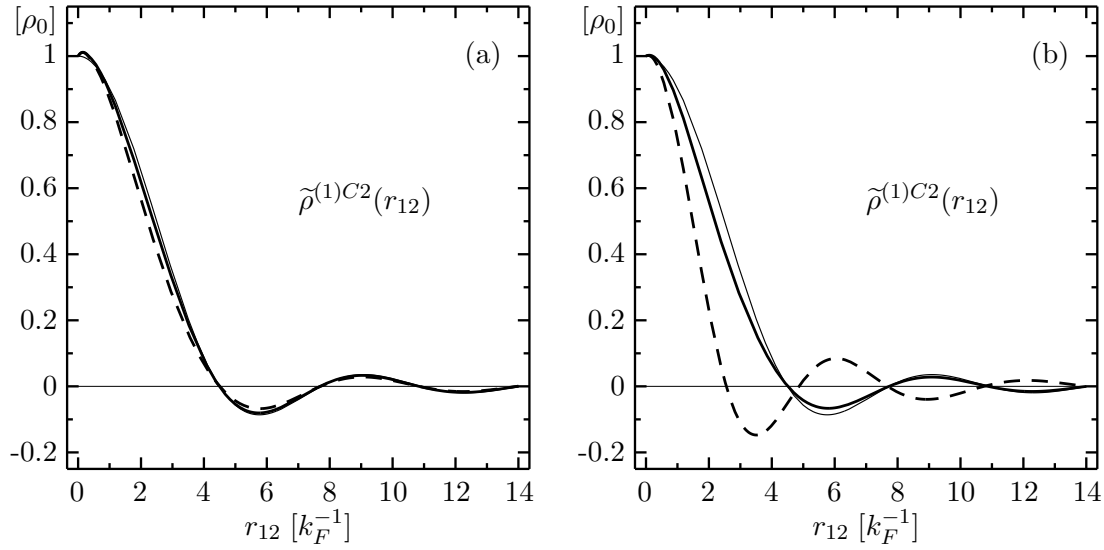


Abbildung 3.17 · Außerdiagonalelemente der korrelierten Einteilchendichte in Ortsdarstellung für Neutronenmaterie mit zustandsunabhängigem materieoptimalen Korrelator  $V$  (---) und dem entsprechenden dichteabhängig skalierten Korrelator (—) bei einer mittleren Dichte  $\rho = 0.2 \text{ fm}^{-3}$  (a) bzw.  $\rho = 1.0 \text{ fm}^{-3}$  (b). Zum Vergleich ist die unkorrelierte Einteilchendichte (—) dargestellt.

wobei die transformierten Koordinaten durch die Gleichungen (2.98) und (2.100) gegeben sind. Die zweidimensionale Integration über die Zylinderkoordinaten  $\varrho$  und  $z$  läßt sich numerisch ausführen. Diese Aufgabe ist nicht trivial, da der Integrand eine stark oszillierende Funktion in beiden Variablen ist, die erst für relativ große Werte in eine Konstante übergeht. Damit wird ein großes Integrationsvolumen nötig; hier werden die Integrationsgrenzen  $R = 30 \text{ fm}$  und  $H = 30 \text{ fm}$  für (3.23) gewählt. Die Integration wird mit einem MATHEMATICA-Programm und der internen Integrationsfunktion „NIntegrate“ (Methode: DoubleExponential) ausgeführt. Die Abbildung 3.17 zeigt das Resultat der Integration für die beiden mittleren Dichten  $\rho = 0.2 \text{ fm}^{-3}$  und  $\rho = 1.0 \text{ fm}^{-3}$  jeweils mit dem zustandsunabhängigen Korrelator  $V$  und mit der dichteabhängigen Erweiterung.

Bei niedrigen Dichten beschränkt sich die Wirkung der Korrelationen auf eine leichte Modifikation der Form der korrelierten Einteilchendichte, insbesondere bleibt die Lage der Nullstellen unbeeinflusst. Bei hohen Dichten gilt diese Beobachtung nur noch eingeschränkt: Der dichteabhängige Korrelator liefert ein den niedrigen Dichten vergleichbares Ergebnis, dagegen zeigt der zustandsunabhängige Korrelator ein völlig anderes Verhalten. Er verändert die Gestalt der Einteilchendichte grundlegend, indem er eine zusätzliche Nullstelle bei kleinen Abständen erzeugt. Dieses Verhalten hat einen starken, unerwünschten Einfluß auf die Besetzungszahlen, der sich im folgenden zeigen wird.

Die Fouriertransformation der korrelierten Einteilchendichte nach (2.66) liefert die korrelierten Impulsraum-Besetzungszahlen

$$\begin{aligned} \tilde{n}(k) &= \frac{4\pi}{k} \int dr \sin(kr) r \tilde{\rho}^{(1)}(r) \\ &= \lambda \Theta(k_F - k) + \frac{4\pi}{k} \int dr \sin(kr) r \tilde{\rho}^{(1)[2]}(r), \end{aligned} \quad (3.24)$$

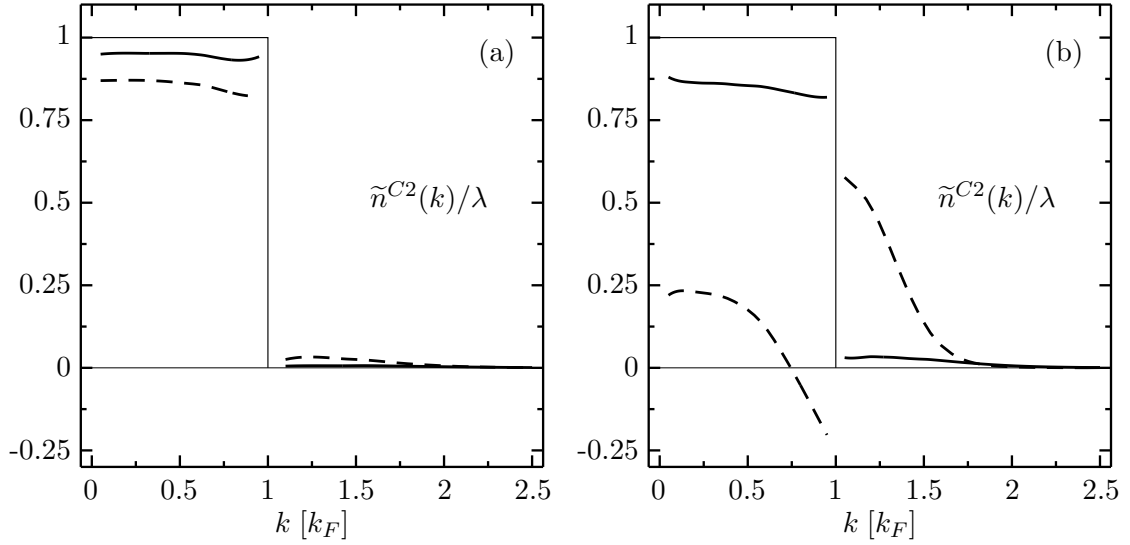


Abbildung 3.18 · Korrelierte Impulsraum-Besetzungszahlen berechnet aus der Fouriertransformation der Einteilchendichten für Neutronenmaterie mit zustandsunabhängigem materieoptimalen Korrelator  $V$  (---) und dem entsprechenden dichteabhängig skalierten Korrelator (—) bei einer mittleren Dichte  $\rho = 0.2 \text{ fm}^{-3}$  (a) bzw.  $\rho = 1.0 \text{ fm}^{-3}$  (b). Zum Vergleich sind die unkorrelierten Besetzungszahlen (Fermikugel) (—) dargestellt.

dabei beschreibt  $\lambda \Theta(k_F - k)$  die unkorrelierten Besetzungszahlen für den Fermiimpuls  $k_F$ . Unterhalb des Fermiimpulses sind die Impulseigenzustände  $\lambda$ -fach besetzt, oberhalb unbesetzt. Um die Fouriertransformation auszuführen, wird die Größe  $r \tilde{\rho}^{(1)[2]}(r)$  parametrisiert. Es zeigt sich, daß es nicht möglich ist, das kurzreichweitige Verhalten dieser Funktion durch eine Parametrisierung mit wenigen Parametern zu beschreiben. Daher wird die Dichtendifferenz durch eine kubische Interpolation für kleine  $r$  und eine Parametrisierung für große  $r$  dargestellt. Die verwendete Parametrisierung lautet

$$f_{\text{fit}}(r) = a (k_F(r + c))^b \rho^{(1)}(k_F(r + c)). \quad (3.25)$$

Die drei Parameter  $a, b$  und  $c$  werden durch einen  $\chi^2$ -Fit an die berechneten Einteilchendichten im Intervall  $5 \text{ fm} \leq r \leq 20 \text{ fm}$  bestimmt. Die Parametrisierung erlaubt eine zuverlässige Extrapolation der Kurve über die berechneten Stützstellen hinaus, so daß der numerische Aufwand reduziert wird. Interpolation und Fit werden bei  $r = 10 \text{ fm}$  durch die Umschaltfunktion

$$\vartheta(r) = \left[ 1 + \exp\left(\frac{r - 10 \text{ fm}}{0.5 \text{ fm}}\right) \right]^{-1} \quad (3.26)$$

ineinander überführt. Es zeigt sich, daß das Resultat weitgehend unabhängig von der Art des Umschaltens ist. Somit ergibt sich die folgende Darstellung, die für die Fouriertransformation verwendet wird:

$$r \tilde{\rho}^{(1)[2]}(r) \cong \vartheta(r) f_{\text{ipol}}(r) + (1 - \vartheta(r)) f_{\text{fit}}(r). \quad (3.27)$$

Die aus der Fouriertransformation resultierenden Impulsraum-Besetzungszahlen sind in Abbildung 3.18 für die beiden untersuchten Dichten und den zustandsunabhängigen und dichteabhängigen Korrelator  $V$  dargestellt. Bei der Dichte  $\rho = 0.2 \text{ fm}^{-3}$  und für den



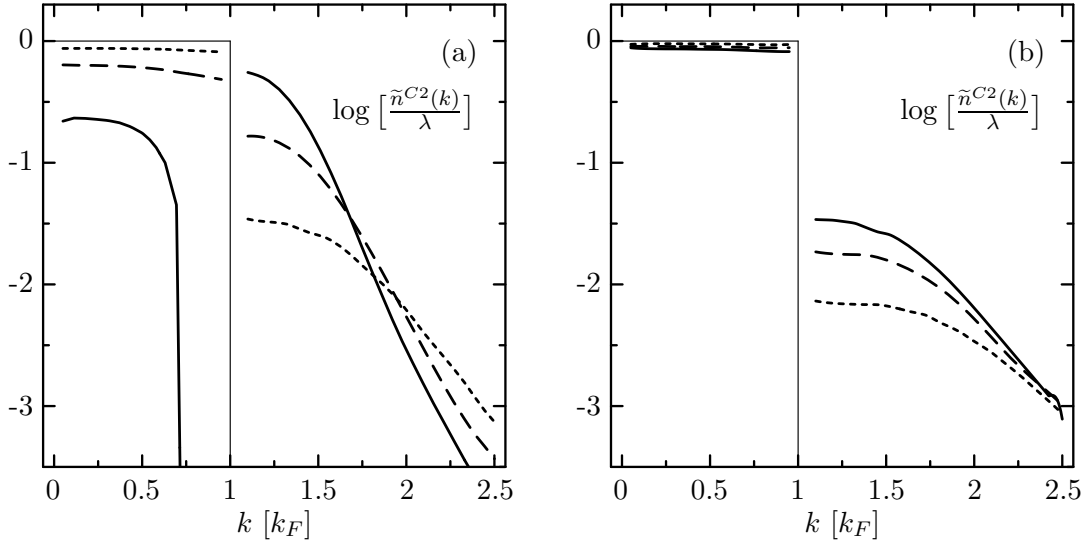


Abbildung 3.19 · Korrelierte Impulsraum-Besetzungszahlen in logarithmischer Darstellung berechnet mit dem zustandsunabhängigen Korrelator  $V$  (a) und dem entsprechenden dichteabhängigen Korrelator (b) für die Dichten  $\rho = 1.0 \text{ fm}^{-3}$  (—),  $\rho = 0.5 \text{ fm}^{-3}$  (---) und  $\rho = 0.2 \text{ fm}^{-3}$  (.....).

dichteabhängigen Korrelator auch bei  $\rho = 1.0 \text{ fm}^{-3}$  zeigt sich das erwartete Ergebnis: Durch die Wirkung der Korrelationen, d.h. mittelbar durch die Wirkung der Wechselwirkung, werden Zustände außerhalb der Fermikugel bevölkert und in entsprechendem Maße Zustände innerhalb der Fermikugel entvölkert.

Der zustandsunabhängige Korrelator zeigt bei  $\rho = 1.0 \text{ fm}^{-3}$  im Prinzip dasselbe Verhalten, jedoch in einer absolut unphysikalischen Ausprägung: Innerhalb der Fermikugel werden „negative Besetzungszahlen“ generiert. Hier manifestiert sich, was sich bereits bei den Zweiteilchendichten durch das falsche Skalenverhalten und bei der Einteilchendichte durch die zusätzliche Nullstelle angedeutet hat: Die zur Berechnung der korrelierten Dichten verwendete Zweiteilchennäherung ist nur eingeschränkt und mit größter Vorsicht anwendbar. Offenbar versagt sie bei hohen Dichten mit zustandsunabhängigen Korrelatoren, indem sie völlig unphysikalische Besetzungszahlen liefert. Diese Pathologie der Zweiteilchennäherung wird durch die Beiträge der höheren Ordnungen der Clusterentwicklung, die beiden diesen Dichten sicher relevant sind, korrigiert. Der zu große negative Zweiteilchenbeitrag der korrelierten Besetzungszahlen wird durch entsprechende positive Drei- und Mehrteilchenbeiträge kompensiert. Die Berechnung dieser höheren Ordnungen liegt jedoch jenseits der numerischen Möglichkeiten.

Das Problem der pathologischen Besetzungszahlen wird durch Verwendung der dichteabhängigen Korrelatoren behoben. Sie erlauben, wie im Zusammenhang mit der Zustandsgleichung diskutiert, eine effektive Beschreibung des Einflusses der höheren Ordnungen der Clusterentwicklung. Die mit dem dichteabhängigen Korrelator  $V$  berechneten Besetzungszahlen in Abbildung 3.18 zeigen eine weit schwächere Entvölkerung der Fermikugel als die entsprechenden zustandsunabhängigen Korrelatoren. Es treten keine negativen Besetzungszahlen auf und die Zahl der oberhalb der Fermikante besetzten Zustände liegt im physikalisch plausiblen Rahmen.

Die Abbildung 3.19 zeigt die Besetzungszahlen für die Dichten  $\rho = 0.2, 0.5$  und  $1.0 \text{ fm}^{-3}$  und die beiden Korrelatoren nochmals in logarithmischer Darstellung. Hier

$\rho$ [fm <sup>-3</sup> ]	$k_F$ [fm <sup>-1</sup> ]	$R_+(r)$		$R_+(r, k_F)$		
		$\kappa$	$\zeta$	$\xi(k_F)$	$\kappa$	$\zeta$
0.2	1.81	0.17	0.15	0.76	0.08	0.06
0.5	2.46	0.44	0.51	0.67	0.13	0.11
1.0	3.09	0.87	1.03	0.59	0.18	0.16

Tabelle 3.5 · Kleinheitsparameter  $\kappa$  und relative Besetzung oberhalb der Fermikante  $\zeta$  für Korrelator  $V$  mit und ohne Dichteabhängigkeit bei drei verschiedenen Dichten.

wird die Struktur der „Impulsschwänze“ sichtbar. Für den dichteabhängigen Korrelator zeigen sie das erwartete Verhalten und eine physikalisch sinnvolle Größenordnung, während sie für den zustandsunabhängigen Korrelator viel zu stark ausfallen.

Um die Beurteilung der Ergebnisse zu quantifizieren, wird das Verhältnis von Teilchen außerhalb der Fermikugel zur Gesamtzahl der Teilchen betrachtet, d.h. die relative Anzahl der aus der Fermikugel angeregten Teilchen:

$$\zeta = \frac{3}{4\pi\lambda k_F^3} \int_{k_F}^{\infty} d^3k \tilde{n}^{C2}(k). \quad (3.28)$$

Dabei ist wichtig zu bemerken, daß jede Ordnung der Clusterentwicklung die Gesamtteilchenzahl erhält, es gilt also auch für die Zweiteilchennäherung:

$$\frac{3}{4\pi\lambda k_F^3} \int_0^{\infty} d^3k \tilde{n}^{C2}(k) = 1. \quad (3.29)$$

Auch das ist, wie die Erhaltung der mittleren Dichte  $\rho$ , eine Folge der Unitarität der Transformation, die auch in den einzelnen Ordnungen der Clusterentwicklung gilt. Die physikalische Bedingung positiver Besetzungszahlen ist zwar für die exakte unitäre Transformation, nicht aber für die einzelnen Ordnungen der Clusterentwicklung zwingend erfüllt.

Die relative Besetzung oberhalb der Fermikante  $\zeta$  ist für den zustandsunabhängigen Korrelator  $V$  und den entsprechenden dichteabhängigen Korrelator bei verschiedenen Dichten in Tabelle 3.5 angegeben. Darüber hinaus sind die Kleinheitsparameter  $\kappa = \rho V_C$  für die verschiedenen Fälle aufgelistet. Sowohl dieser Kleinheitsparameter als auch die relative Besetzung oberhalb der Fermikante zeigen für den zustandsunabhängigen Korrelator bei höheren Dichten unphysikalisch hohe Werte. Insbesondere sind relative Besetzungen  $\zeta > 1$ , wie sie für die Dichte  $\rho = 1.0 \text{ fm}^{-3}$  auftreten, unsinnig, da mehr Teilchen als in dem System vorhanden über die Fermikante angeregt werden, unterhalb der Fermikante sind also negative Besetzungszahlen nötig, um die Gesamtteilchenzahlerhaltung sicherzustellen. Für diesen Fall liegt der Kleinheitsparameter in der Größenordnung Eins, d.h. bereits dieses einfachste Kriterium deutet auf einen Zusammenbruch der Zweiteilchennäherung hin. Auch für die Dichte  $\rho = 0.5 \text{ fm}^{-3}$  liegt der Kleinheitsparameter für den zustandsunabhängigen Korrelator mit  $\kappa \approx 0.5$  bereits außerhalb des Bereichs, in dem der Zweiteilchennäherung vertraut werden kann — die empirische Grenze liegt bei  $\kappa \lesssim 0.3$ . Die relative Besetzung ist mit 50% ebenfalls unphysikalisch hoch. Nur bei  $\rho = 0.2 \text{ fm}^{-3}$  liefert der zustandsunabhängige Korrelator physikalisch sinnvolle Werte für den Kleinheitsparameter und die relative Besetzung.

Für den dichteabhängigen Korrelator ändert sich das grundlegend. Sowohl der Kleinheitsparameter als auch die relative Besetzung oberhalb der Fermikante bleiben für alle Dichten unter 20%. Wie zu erwarten ist, steigt die relative Besetzung zwar mit der Dichte an, aber dieser Anstieg erfolgt wesentlich langsamer als für den zustandsunabhängigen Korrelator; analoges gilt für den Kleinheitsparameter.

Zusammenfassend läßt sich feststellen: Offenbar sind die Dichten und insbesondere die Impulsraum-Besetzungszahlen eine sehr viel sensiblere Observable als der Energieerwartungswert, wenn es um die Beurteilung der Güte der Zweiteilchennäherung geht. Im betrachteten Dichtebereich zeigte die Energie in Zweiteilchennäherung lediglich eine Überbindung von ca. 25% verglichen mit exakten Rechnungen, d.h. die Näherung ist nicht gut, aber auch nicht unbrauchbar. Dagegen sind die korrelierten Impulsraum-Besetzungszahlen in Zweiteilchennäherung im gleichen Dichtebereich völlig unphysikalisch und die Näherung somit unbrauchbar.

Daraus ergibt sich ein starkes Argument für die effektive Beschreibung der höheren Clusterordnungen durch einen dichteabhängigen Korrelator in Zweiteilchennäherung: Im vorliegenden Fall wurde die Dichteabhängigkeit festgelegt, um die 25% Abweichung der Energie auszugleichen. Dieselbe Dichteabhängigkeit angewendet auf die Berechnung der Impulsraum-Besetzungszahlen verhindert den unphysikalischen Kollaps der Zweiteilchennäherung und liefert Resultate in der erwarteten Größenordnung. Das ist ein überzeugendes Indiz, daß die Dichteabhängigkeit die generellen physikalischen Eigenschaften der höheren Clusterordnungen zu simulieren vermag und nicht nur einen zusätzlichen Freiheitsgrad für den Fit einer speziellen Observablen darstellt. Die Dichteabhängigkeit beschreibt in effektiver Weise die Physik der Mehrteilchenkorrelationen.

Abschließend sei bemerkt, daß der hier diskutierte Hochdichtefall mit  $\rho = 1 \text{ fm}^{-3}$  nicht als realistische Beschreibung nuklearer Systeme angesehen werden sollte. Bei derartigen Dichten ist eine nicht-relativistische Behandlung und die Verwendung des Potentialbildes nicht mehr gerechtfertigt. Die hier vorgestellten Studien behandeln ein Homework-Problem, das nur dem Vergleich verschiedener nicht-relativistischer, potentialbasierter Methoden dient.

### 3.4 Homework-2: Zustandsgleichung

Das zweite Szenario — das *Homework-2*-Problem — wurde Mitte der 70er Jahre von V.R. Pandharipande, R.B. Wiringa und B.D. Day [PaWi75] formuliert. Es basiert auf dem Zentralteil der  ${}^3S_1$ - ${}^3D_1$ -Komponente des Reid-Potentials [Reid68]

$$\begin{aligned} v_2(r) = & \left[ 9924.3 \text{ MeV} \exp(-4.2 \text{ fm}^{-1} r) \right. \\ & - 3187.8 \text{ MeV} \exp(-2.8 \text{ fm}^{-1} r) \\ & + 105.468 \text{ MeV} \exp(-1.4 \text{ fm}^{-1} r) \\ & \left. - 10.463 \text{ MeV} \exp(-0.7 \text{ fm}^{-1} r) \right] / (0.7 \text{ fm}^{-1} r), \end{aligned} \quad (3.30)$$

der sowohl eine kurzreichweitige Abstoßung als auch eine mittelreichweitige Anziehung enthält. Wesentlicher Unterschied zum Homework-1-Problem ist der anziehende Charakter des Potentials, der bewirkt, daß die Zustandsgleichung ein Energieminimum bei endlicher Dichte ausbildet. Auch hier existieren eine Reihe von Rechnungen mit anderen etablierten Methoden der Vielteilchenphysik, hier werden insbesondere Ergebnisse einer Variational-Monte-Carlo- [Zabo77] sowie von Jastrow-Rechnungen verschiedener Ordnung bis hin zur Fermi-Hypernetted-Chain-Summation [BeCi76] herangezogen.

Das Prozedere folgt weitgehend dem in den vorangehenden Abschnitten für das Homework-1-Problem gezeigten. Die folgende Darstellung kann also kurz gehalten und auf die Ergebnisse beschränkt werden.

### 3.4.1 Zustandsgleichung in Zweiteilchennäherung

Der erste Schritt zur Anwendung der Methode der unitären Korrelatoren ist die Bestimmung einer optimalen Korrelationsfunktion. Der direkteste Weg ist die Wahl einer Parametrisierung für die Korrelationsfunktion und die Minimierung der korrelierten Materieenergie in Zweiteilchennäherung durch Variation der Korrelatorparameter. Aus der Minimierung bei einer Dichte  $\rho = 0.2 \text{ fm}^{-3}$  mit der Parametrisierung (3.2) resultieren die Parameter

$$\alpha = 1.500 \text{ fm}, \quad \beta = 1.279 \text{ fm}, \quad \eta = 0.160, \quad V_C = 0.80 \text{ fm}^3. \quad (3.31)$$

Dieser Korrelator wird im folgenden als materieoptimaler Korrelator bezeichnet. Es zeigt sich, daß auch für dieses Potential die gewählte Parametrisierung (3.2) die besten Ergebnisse, d.h. die niedrigsten Energien liefert. Andere Parametrisierungen des langreichweitigen Teils des Korrelators, etwa durch einen gaußförmigen oder einfach exponentiellen Abfall, ergeben deutlich schlechtere Ergebnisse.

Da das Homework-2-Potential bei mittleren Abständen anziehend ist, läßt sich ein optimaler Korrelator allein auf Basis des Zweiteilchensystems definieren. Es existiert zwar kein gebundener Zustand, jedoch läßt sich wie in Abschnitt 3.1.1 ein optimaler Korrelator durch Minimierung der Energie des  $E = 0$ -Streuzustandes bei gegebener konstanter Ansatzwellenfunktion bestimmen. Der anziehende Charakter des Homework-2-Potentials bewirkt, daß ein eindeutiges Minimum mit einem Korrelator endlicher Reichweite bereits im Zweiteilchensystems existiert. Damit ist eine Festlegung der Reichweite des Korrelators anhand der Materieenergie, wie es beim rein abstoßenden Homework-1-Potential nötig war, überflüssig. Die Parameter des mit der Parametrisierung (3.2) gewonnenen zweiteilchenoptimalen Korrelators lauten

$$\alpha = 1.622 \text{ fm}, \quad \beta = 1.448 \text{ fm}, \quad \eta = 0.162, \quad V_C = 1.05 \text{ fm}^3. \quad (3.32)$$

Mit diesen beiden Korrelatoren wird die Zustandsgleichung von Kernmaterie ( $\lambda = 4$ ) in Zweiteilchennäherung für das Homework-2-Problem berechnet, die Abbildung 3.20(a) zeigt das Ergebnis. Die erste wesentliche Beobachtung ist, daß die Zustandsgleichung in Zweiteilchennäherung für den materieoptimalen Korrelator ein Minimum ausbildet

$$\rho^{\text{sat}} = 0.53 \text{ fm}^{-3}, \quad \varepsilon^{\text{sat}} = 1.76 \text{ MeV}. \quad (3.33)$$

Daß es sich bei dem Minimum nur um ein lokales Minimum bei positiver Energie handelt, ist auf die relativ schwache Anziehung des Potentials zurückzuführen. Aus diesem Grunde liefert der zweiteilchenoptimale Korrelator auch kein Minimum, sondern lediglich eine Schulter mit Wendepunkt bei  $\rho \approx 0.2 \text{ fm}^{-3}$ .

Die detaillierte Struktur der Zustandsgleichung wird in Tabelle 3.6 und Abbildung 3.20(b) anhand der Einzelbeiträge dargestellt. Der wesentliche Unterschied zum rein abstoßenden Homework-1-Potential ist der negative — anziehende — Beitrag des lokalen Potentials (vergleiche Abbildung 3.8(a) für das Homework-1-Problem). Dieser Beitrag ist um einen Faktor zwei größer als der abstoßende lokale Term der korrelierten kinetischen Energie, so daß die Summe aller lokalen Terme negativ ist. Die

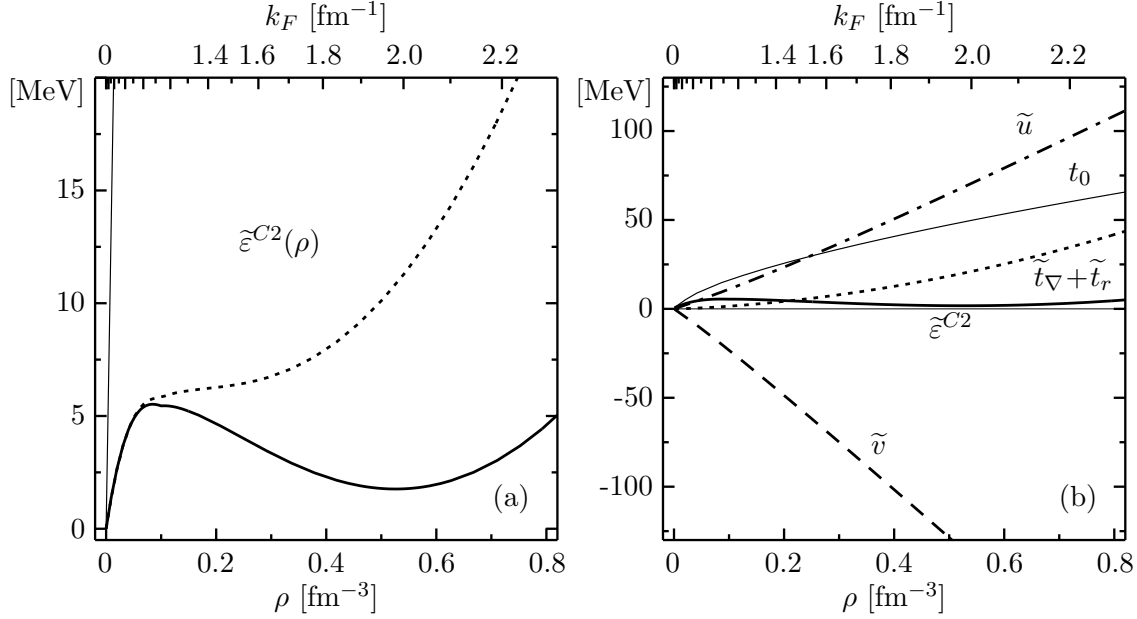


Abbildung 3.20 · (a) Zustandsgleichung für Kernmaterie in Zweiteilchennäherung mit dem Homework-2-Potential unter Verwendung des zweiteilchenoptimalen (.....) bzw. des materieoptimalen Korrelators (—). Der Kleinheitsparameter erreicht den Wert  $\kappa \approx 0.3$  bei  $\rho \approx 0.28 \text{ fm}^{-3}$  bzw.  $0.37 \text{ fm}^{-3}$ . Zum Vergleich ist die unkorrelierte Energie angedeutet (—). (b) Einzelbeiträge zur Zustandsgleichung mit dem materieoptimalen Korrelator: kinetische Energie  $t_0$  (—), korreliertes Potential  $\tilde{v}$  (---), lokaler Teil der korrelierten kinetischen Energie  $\tilde{u}$  (---), effektive Massenkorekturen  $\tilde{t}_\nabla + \tilde{t}_r$  (.....) und Gesamtenergie  $\tilde{\varepsilon}^{C^2}$  (—).

Tatsache, daß die Energie bei großen Dichten anwächst, ist allein auf den abstoßenden Beitrag der effektiven Massenkorekturen zurückzuführen, der die Anziehung des Potentials kompensiert. Erst die Existenz der effektiven Massenkorekturen mit der bereits diskutierten  $\rho^{5/3}$ -Abhängigkeit macht die Beschreibung der Sättigung für anziehende Potentiale prinzipiell möglich. Die bereits erwähnten Jastrow-Korrelationen erzeugen keinen derartigen Term und sind demzufolge prinzipiell nicht in der Lage, Sättigung in Zweiteilchennäherung zu beschreiben. Dies wird in einem Vergleich in Abschnitt 3.4.3 näher diskutiert.

Daß die Methode der unitären Korrelatoren — neben der prinzipiellen Möglichkeit — auch tatsächlich ein Minimum der Zustandsgleichung in Zweiteilchennäherung bei einem sehr schwach anziehenden Potential beschreibt, ist bemerkenswert. Man muß sich vor Augen führen, daß die unkorrelierte Energie eine stark monoton wachsende Funktion der Dichte ist; in Abbildung 3.20(a) ist dies angedeutet. Im Bereich des Minimums nimmt die unkorrelierte Energie Werte von etwa 700 MeV an, die der Korrelator fast auf Null reduziert und ein Minimum erzeugt. Darüber hinaus muß man berücksichtigen, daß die Gesamtenergie aus Beiträgen unterschiedlichen Vorzeichens zusammengesetzt ist, die bis zu zwei Größenordnungen über dem Wert der Gesamtenergie liegen. Daß die Methode trotz dieser Erschwernisse auf Anhieb ein Resultat der richtigen Größenordnung liefert, ist ein Indiz für die Stabilität des Ansatzes.

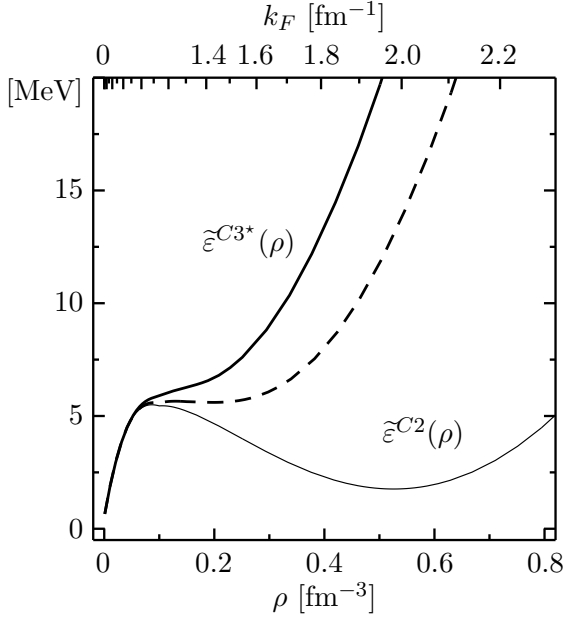


Abbildung 3.21 · Zustandsgleichung für Kernmaterie in Dreiteilchennäherung unter Verwendung des materieoptimalen Korrelators. Dargestellt ist die Energie in Zweiteilchennäherung  $\tilde{\varepsilon}^{C2}$  (—), die Energie in Zweiteilchennäherung unter Hinzunahme der Dreiteilchenbeiträge des korrelierten Potentials  $\tilde{\varepsilon}^{C2} + \tilde{v}^{[3]}$  (---) und die Energie in Dreiteilchennäherung  $\tilde{\varepsilon}^{C3*} = \tilde{\varepsilon}^{C2} + \tilde{v}^{[3]} + \tilde{u}^{[3]}$  (—). Der Kleinheitsparameter erreicht den Wert  $\kappa \approx 0.3$  bei  $\rho \approx 0.37 \text{ fm}^{-3}$ .

### 3.4.2 Dreiteilchenbeiträge zur Zustandsgleichung

In Analogie zu der Behandlung des Homework-1-Problems in Abschnitt 3.2.1 werden nun die Dreiteilchenbeiträge zur Zustandsgleichung für das Homework-2-Potential betrachtet. Die Dreiteilchenbeiträge werden wie bereits im oben genannten Falle in störungstheoretischer Sicht behandelt, d.h. der optimale Korrelator wird in Zweiteilchennäherung bestimmt und die Dreiteilchenbeiträge für diesen Korrelator werden lediglich addiert. Dieses Verfahren ist sinnvoll, solange die Beiträge der dritten Ordnung klein sind. Eine Energieminimierung in Dreiteilchennäherung wäre numerisch zu kostspielig.

Die Dreiteilchenkorrelationen werden durch die verallgemeinerte Koordinatentransformation, wie sie in Abschnitt 1.4.3 beschrieben und in Abschnitt 3.2.1 verwendet wurde, dargestellt. Mit der Einschränkung auf Terme bis zur Ordnung  $k_F^6$  gilt

$$\tilde{\varepsilon}^{C3*} = \tilde{\varepsilon}^{C2} + \tilde{v}^{[3]} + \tilde{u}^{[3]}. \quad (3.34)$$

Die Dreiteilchenbeiträge zum korrelierten Potential  $\tilde{v}^{[3]}$  und zum lokalen Teil der korrelierten kinetischen Energie  $\tilde{u}^{[3]}$  werden numerisch durch 6-dimensionale Monte-Carlo-Integration berechnet.

Die Zustandsgleichung für Kernmaterie in Dreiteilchennäherung mit dem materieoptimalen Korrelator ist in Abbildung 3.21 dargestellt. Offenbar haben die Dreiteilchenkorrelationen einen starken Effekt bei Dichten  $\rho > 0.2 \text{ fm}^{-3}$ . In Dreiteilchennäherung zeigt sich kein Minimum in der Zustandsgleichung, lediglich ein Wendepunkt bei  $\rho \approx 0.15 \text{ fm}^{-3}$  verbleibt. Beschränkt man sich auf die Hinzunahme der Dreiteilchenbeiträge des Potentials  $\tilde{v}^{[3]}$ , so bleibt ein extrem flaches lokales Minimum bei  $\rho \approx 0.2 \text{ fm}^{-3}$  zurück. Die Hinzunahme der lokalen Dreiteilchenbeiträge der kinetischen Energie zerstört dieses jedoch.

Hier sind zwei Punkte anzumerken: Erstens, der Effekt der Dreiteilchenbeiträge auf die Zustandsgleichung scheint dramatisch zu sein, ist aber bezogen auf die einzelnen Beiträge, d.h. das korrelierte Potential bzw. das kinetische Potential, nur in der Größenordnung von wenigen Prozent für Dichten um  $\rho \approx 0.5 \text{ fm}^{-3}$  (siehe Tabelle 3.6). Hier macht sich die Subtraktion großer Zahlen schmerzlich bemerkbar. Zweitens, der

$\rho$ [fm <sup>-3</sup> ]	$t_0$ [MeV]	$\tilde{v}$ [MeV]	$\tilde{u}$ [MeV]	$\tilde{t}_\nabla + \tilde{t}_r$ [MeV]	$\tilde{\varepsilon}^{C2}$ [MeV]	$\tilde{v}^{[3]}$ [MeV]	$\tilde{u}^{[3]}$ [MeV]	$\tilde{\varepsilon}^{C3*}$ [MeV]
0.1	16.16	-23.26	11.07	1.47	5.45	0.14	0.29	5.88
0.2	25.65	-48.66	23.47	4.20	4.65	0.94	1.09	6.69
0.3	33.62	-74.92	36.73	7.92	3.35	2.74	2.91	8.99
0.4	40.72	-101.64	50.55	12.65	2.29	5.71	5.36	13.37
0.5	47.25	-128.62	64.74	18.41	1.79	9.97	7.86	19.61
0.6	53.36	-155.77	79.18	25.19	1.96	15.34	10.67	27.97
0.8	64.64	-210.35	108.52	41.77	4.59	29.63	19.48	53.70
1.0	75.01	-265.09	138.20	62.27	10.39	49.53	33.26	93.17

Tabelle 3.6 · Beiträge zur Energie pro Teilchen für das Homework-2-Problem in Zwei- und Dreiteilchennäherung für den materieoptimalen Korrelator bei einigen ausgewählten Dichten.

optimale Korrelator wurde in Zweiteilchennäherung bestimmt und im Sinne einer Störungsrechnung in Dreiteilchennäherung angewendet. Es ist zu erwarten, daß sich durch Variation der Korrelatorparameter die Energie in Dreiteilchennäherung weiter verringern läßt, ein solcher dreiteilchenoptimaler Korrelator könnte ohne weiteres ein Minimum in der Umgebung des Wendepunktes der obigen Zustandsgleichung erzeugen. Ein solcher Effekt könnte bereits durch eine geringfügige Änderung der Korrelatorparameter erreicht werden. Leider ist eine derartige Rechnung momentan zu rechenzeitintensiv, so daß an dieser Stelle darauf verzichtet werden muß.

### 3.4.3 Vergleich mit Ergebnissen der Jastrow-Methode

Schließlich sollen die Ergebnisse der Methode der unitären Korrelatoren in Zwei- und Dreiteilchennäherung mit den Resultaten entsprechender Rechnungen mit Jastrow-Korrelationsfunktionen verglichen werden. Dazu wird eine Arbeit von O. Benhar et al. [BeCi76] herangezogen, in der die Energien mit verschiedenen Jastrow-Korrelationsfunktionen in Zwei- und Dreiteilchennäherung und in Fermi-Hypernetted-Chain-Summation bestimmt werden. Desweiteren werden die in einem Artikel von J.G. Zabolitzky [Zabo77] angegebenen Ergebnisse einer Monte-Carlo-Variationsrechnung sowie einer Brueckner-Rechnung niedrigster Ordnung aufgegriffen. Es wird davon ausgegangen, daß die FHNC-Rechnung dem exakten Ergebnis recht nahe kommt. Diese Annahme ist zwar eher optimistisch, wird aber von der guten Übereinstimmung mit dem Ergebnis der Monte-Carlo-Variationsrechnung, die bis auf einen statistischen Fehler von  $\pm 0.5$  MeV als exakt gelten kann, bestätigt. Daraus ergibt sich eine (mutmaßliche) Sättigungsdichte von  $\rho^{\text{sat}} \approx 0.23 \text{ fm}^{-3}$  und eine Grundzustandsenergie von  $\varepsilon^{\text{sat}} \approx 2.5 \text{ MeV}$ .

Die Abbildung 3.22 zeigt die Ergebnisse mit Jastrow-Korrelationsfunktionen nach [BeCi76]. Für die Jastrow-Korrelationsfunktion  $f(r)$  wurde eine Parametrisierung mit fünf Freiheitsgraden gewählt, von denen einer durch eine zusätzliche Nebenbedingung fixiert wurde. Zwei der untersuchten Nebenbedingungen sind (a) die Beschränkung der Korrelationsfunktion auf das Intervall  $0 \leq f(r) \leq 1$ , d.h. insbesondere das Ausschließen eines Überschwingens der Korrelationsfunktion und (b) die Forderung, daß das



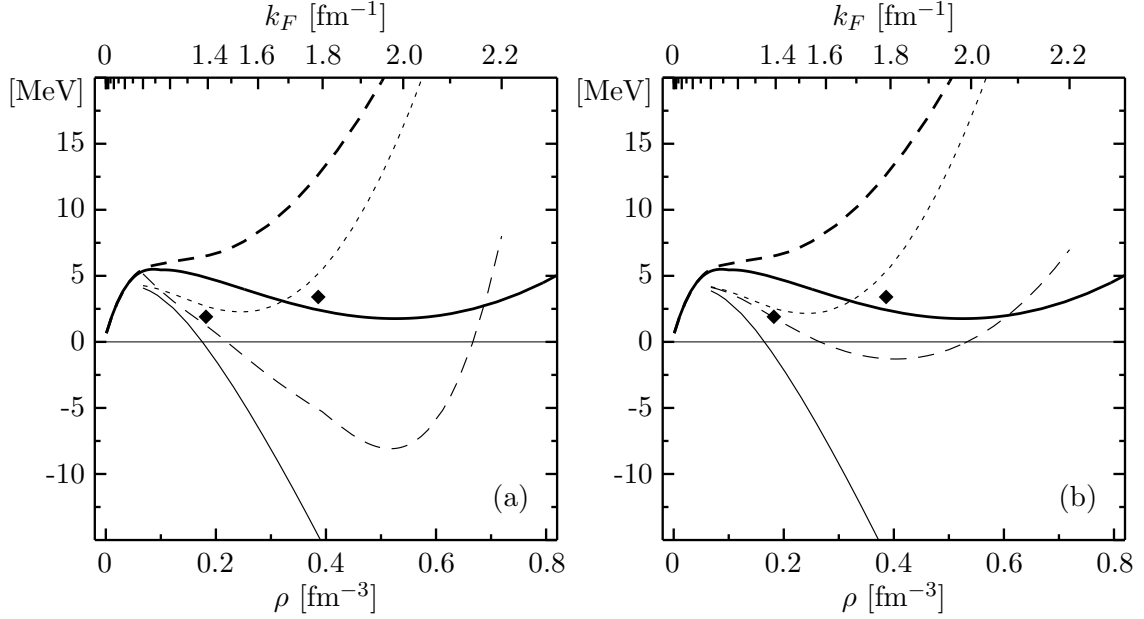


Abbildung 3.22 · Zustandsgleichung für Kernmaterie mit dem Homework-2-Potential. Ergebnisse mit materieoptimalen Korrelator in Zwei- (—) und Dreiteilchennäherung (---) im Vergleich mit Ergebnissen mit Jastrow-Korrelatoren in Zwei- (—) und Dreiteilchennäherung (---), sowie in Fermi-Hypernetted-Chain Näherung (-----) nach [BeCi76]. Die Rauten bezeichnen Ergebnisse einer „exakten“ Variations-Monte-Carlo-Rechnung [Zabo77]. (a) Jastrow-Korrelationsfunktion mit Nebenbedingung  $0 \leq f(r) \leq 1$  bestimmt. (b) Jastrow-Korrelator mit „Normerhaltung“ („sequential condition“ siehe [BeCi76]).

Integral (2.88) über die Diagonalelemente der korrelierten Zweiteilchendichte in Zweiteilchennäherung gerade die mittlere Dichte  $\rho$  ergibt, was mit einem Überschwingen der Korrelationsfunktion  $f(r)$  einhergeht. Es sei bemerkt, daß die letztere, hier als „Normerhaltung“ bezeichnete, Bedingung vom unitären Korrelator per Constructionem erfüllt wird. Die verbleibenden vier Parameter werden durch Energieminimierung in Zwei- bzw. Dreiteilchennäherung bestimmt.

Seien zunächst die Zweiteilchennäherungen beider Methoden verglichen: Die Methode der unitären Korrelatoren liefert in Zweiteilchennäherung bereits ein Minimum bei etwa der zweifachen Sättigungsdichte und ungefähr der Energie, die entsprechend dem Ergebnis FHNC-Rechnung zu erwarten sind. Dagegen ist die Jastrow-Methode in Zweiteilchennäherung prinzipiell nicht in der Lage, Sättigung für anziehende Potentiale zu liefern. Grund dafür ist, daß in Zweiteilchenordnung nur Terme bis zur Ordnung  $k_F^3$  auftreten, nämlich vom korrelierten Potential und einer Art kinetischem Potential, die aber für anziehende Potentiale negative Koeffizienten haben. Als Konsequenz kollabiert die Energie mit wachsender Dichte. Bei den unitären Korrelatoren wird das durch die effektiven Massenterme mit  $k_F^5$ -Abhängigkeit vermieden und die Energie wächst bei großen Dichten zwangsläufig an.

In Dreiteilchennäherung erzeugen auch die Jastrow-Korrelationen durch den führenden  $k_F^6$ -Term Sättigung. Die Energie des Minimums liegt jedoch weit unter der realistischen Größenordnung bei negativen Werten und ist stark von der Korrelationsfunktion bzw. der gewählten Nebenbedingung abhängig. Hier scheint die „Normerhaltungsbedingung“, die eine unitäre Transformation nachahmt, hilfreich zu sein, indem sie die



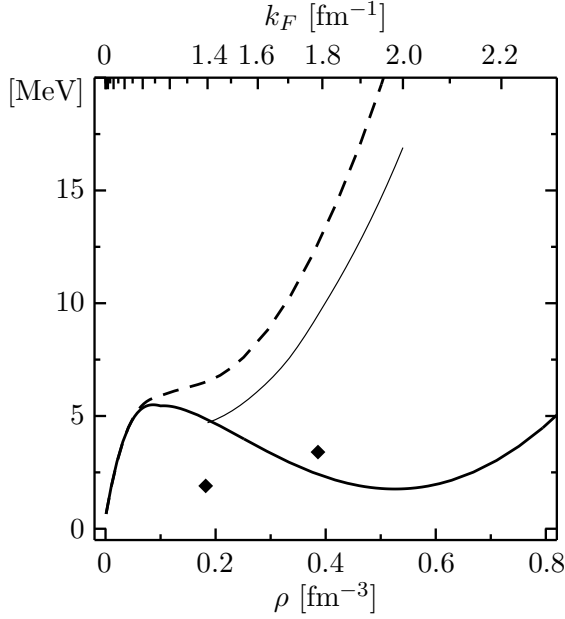


Abbildung 3.23 · Zustandsgleichung für Kernmaterie mit dem Homework-2-Potential. Ergebnisse mit materieoptimalen Korrelator in Zwei- (—) und Dreiteilchennäherung (---) im Vergleich mit Ergebnissen einer Brueckner-Rechnung niedrigster Ordnung (—) [Zabo77]. Die Rauten bezeichnen Ergebnisse einer Variations-Monte-Carlo-Rechnung [Zabo77].

Sättigungsenergie anhebt, d.h. die Überbindung reduziert. Der unitäre Korrelator in Dreiteilchennäherung zeigt kein Minimum mehr. Das ist zumindest teilweise darauf zurückzuführen, daß die drei Korrelatorparameter nicht in Dreiteilchennäherung minimiert wurden, sondern die optimalen Parameter der Zweiteilchennäherung aufgrund des Rechenaufwands übernommen werden mußten. Im Falle der Jastrow-Rechnungen wurde diese Neuminimierung in Dreiteilchennäherung aber durchgeführt. Es ist also durchaus möglich, daß der unitäre Korrelator ein Minimum in der Nähe des realistischen Sättigungspunktes liefert, wenn eine Neubestimmung des Korrelators durchgeführt würde.

Schließlich kann auf Basis der Jastrow-Korrelatoren eine Fermi-Hypernetted-Chain-Rechnung durchgeführt werden. Das Resultat stimmt gut mit den Ergebnissen einer Monte-Carlo-Variationsrechnung [Zabo77], die bis auf statistische Fehler von  $\pm 0.5$  MeV als exakt gelten kann, überein. Die Möglichkeit einer derartigen Partialsummation der höheren Clusterordnungen besteht bei den unitären Korrelatoren (noch) nicht, da die korrelierten Operatoren höherer Ordnungen weitaus komplexer als in der Jastrow-Theorie sind. Dennoch sind die Ergebnisse der unitären Korrelatoren bereits in Dreiteilchenordnung in qualitativer Übereinstimmung mit den FHNC-Resultaten, ganz im Gegensatz zur Jastrow-Dreiteilchennäherung.

Abschließend sollen noch Ergebnisse einer Brueckner-Rechnung in niedrigster Ordnung zum Vergleich (Abbildung 3.23) herangezogen werden. Die Brueckner-Rechnung zeigt im betrachteten Dichteintervall kein Minimum, ist aber der Dreiteilchennäherung des unitären Korrelators verblüffend ähnlich, liegt jedoch etwa 2 MeV darunter.

Zusammenfassend läßt sich festhalten: In niedrigen Ordnungen der Clusterentwicklung ist die Methode der unitären Korrelatoren den Jastrow-Korrelationen weit überlegen. Sie liefert in Zweiteilchennäherung bereits Sättigung und in Dreiteilchennäherung ein qualitativ mit der FHNC- und der Brueckner-Rechnung gut übereinstimmendes Ergebnis. Die Abweichung zu diesen beiden Rechnungen liegt in der gleichen Größenordnung wie deren Abweichung untereinander. Erstrebenswert wäre eine Energieminimierung in Dreiteilchennäherung, so daß das Minimum in Dreiteilchennäherung reproduziert werden könnte. Eventuell ist auch eine Parametrisierung des Korrelators mit mehr Freiheitsgraden wie im Falle des Jastrow-Korrelators denkbar.

## Kapitel 4

---

# Kernmaterie mit phänomenologischen Potentialen

Die im vorangehenden Kapitel untersuchten Homework-Potentiale sind als rein schematische Darstellungen spezieller Aspekte der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung konzipiert. Die resultierenden Zustandsgleichungen und Dichten haben wenig mit den Eigenschaften physikalischer Kernmaterie gemein. Um dem nuklearen Problem näher zu kommen, werden in diesem Kapitel zwei phänomenologische NN-Potentiale aufgegriffen, um die Zustandsgleichung von Kernmaterie im Rahmen der Methode der unitären Korrelatoren zu studieren.

### 4.1 Gammel-Christian-Thaler-Potential

Gerade die Beschreibung der Sättigung in Kernmaterie, d.h. der Ausbildung eines Minimums der Energie als Funktion der Dichte, ist für realistische Kernmaterierechnungen von besonderem Interesse und stellt für verwendete Näherungen einen essentiellen Test dar. Daher wird in diesem Abschnitt das semi-realistische Gammel-Christian-Thaler-Potential (kurz GCT-Potential) [GaCh57] aufgegriffen. Es setzt sich aus einem Zentral- und einem Tensorteil zusammen

$$\mathbf{v}_{\text{GCT}} = \sum_{S,T}^{\{0,1\}} v_{ST}^c(\mathbf{r}) \mathbf{\Pi}_{ST} + \sum_T^{\{0,1\}} v_T^t(\mathbf{r}) \mathbf{S}_{12} \mathbf{\Pi}_T. \quad (4.1)$$

Die Radialabhängigkeiten sind durch eine einfache phänomenologische Parametrisierung, bestehend aus einem Hard-Core mit Radius  $r_{\text{core}} = 0.5 \text{ fm}$  und einer Yukawafunktion mit zwei freien Parametern, gegeben

$$v(r) = \begin{cases} \infty & ; r < r_{\text{core}} \\ A \exp(-\mu r)/(\mu r) & ; r \geq r_{\text{core}} \end{cases}. \quad (4.2)$$

Die Parameter sind durch Anpassung der Grundzustandseigenschaften des Deuterons (Bindungsenergie und Quadrupolmoment) und einem groben Fit der Streuphasen bei niedrigen Energien festgelegt. Die einzelnen Parameter sind in Tabelle 4.1 aufgeführt. Die Radialabhängigkeiten sind in Abbildung 4.1 dargestellt.

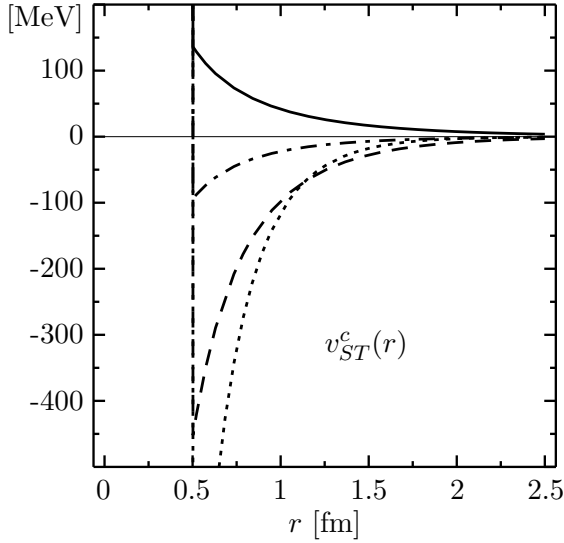


Abbildung 4.1 · Radialabhängigkeiten des Zentralteils des GCT-Potentials in  $ST$ -Projektordarstellung. Dargestellt sind die Komponenten zu den Spin-Isospinquantenzahlen  $ST = 00$  (—),  $01$  (---),  $10$  (.....) und  $11$  (-.-.-).

Das GCT-Potential besitzt einige Eigenschaften, die es als Testpotential für die Anwendung der Methode der unitären Korrelatoren besonders attraktiv machen. Zum einen liefert es mit anerkannten Methoden, wie z.B. Brueckner- $G$ -Matrix-Rechnungen [BrGa58], eine Zustandsgleichung, die Sättigung bei Dichten und Energien in der Umgebung der experimentellen Werte zeigt. Darüber hinaus bietet es die Möglichkeit die Methode der unitären Korrelatoren an einem „echten“ Hard-Core-Potential zu testen. Das macht eine neue Klasse von Parametrisierungen der Korrelationsfunktionen notwendig. Ebenso läßt sich die Bedeutung von spin-isospinabhängigen Korrelatoren im Vergleich zu globalen, spin-isospinunabhängigen Korrelatoren studieren. Schließlich bietet sich das GCT-Potential zusammen mit den sog. GT5100- und GT5200-Potentialen [RiLo71] zum weiterführenden Studium der Effekte von Tensorkorrelationen an. Die drei genannten Potentiale basieren auf der gleichen Parametrisierung und unterscheiden sich lediglich in der relativen Stärke von Tensor und Zentralteil im  $ST = 10$  Kanal, trotzdem reproduzieren alle Potentiale die Deuterondaten und die Streuphasen. Das GCT-Potential besitzt die schwächste Tensorkomponente und entsprechend eine stär-

$ST$	Zentral $v^c$		Tensor $v^t$	
	$A$ [MeV]	$\mu$ [fm $^{-1}$ ]	$A$ [MeV]	$\mu$ [fm $^{-1}$ ]
00	113.0	1.0	—	—
01	-905.6	1.7	—	—
11	-150.0	1.5	57.5	1.12
GCT-Potential				
10	-6395.0	2.936	-45.0	0.73421
GT5200-Potential				
10	-1587.7	2.3576	-238.38	1.1788
GT5100-Potential				
10	-121.94	1.4112	-498.73	1.4112

Tabelle 4.1 · Parameter der Radialabhängigkeiten des GCT-, des GT5200- und des GT5100-Potentials in den verschiedenen Spin-Isospinkanälen nach [RiLo71]. In den Kanälen  $ST = 00, 01, 11$  sind die Parameter für alle Potentiale gleich, nur der  $ST = 10$ -Kanal unterscheidet sich. In allen Kanälen ist der Core-Radius  $r_{\text{core}} = 0.5$  fm.

kere Zentralkomponente, im GT5100-Potential sind die Verhältnisse gerade umgekehrt.

Dieser Abschnitt beschränkt sich auf die Anwendung von Zentralkorrelatoren, die nur die Abstandsabhängigkeit, nicht jedoch die Tensorstruktur der Wechselwirkung ändern. Da der Erwartungswert des Tensoroperators in isotroper spinesättigter Kernmaterie verschwindet, wenn diese durch eine Slaterdeterminante beschrieben wird, und da der (zentral-) korrelierte Tensorteil der Wechselwirkung lediglich eine modifizierte Radialabhängigkeit aber keine neuen Operatorkomponenten zeigt, verschwindet der Beitrag des Tensorteil vollständig. Mit der Einschränkung auf Zentralkorrelatoren trägt automatisch nur der Zentralteil der Wechselwirkung bei.

### 4.1.1 Globaler Korrelator

Zunächst soll die Bindungsenergie von Kernmaterie ( $\lambda = 4$ ) für das GCT-Potential mit Hilfe eines spin-isospinunabhängigen — globalen — Korrelators untersucht werden. Das Vorgehen entspricht dem des vorangehenden Kapitels: Nach Wahl einer Parametrisierung für die Korrelationsfunktion  $R_+(r)$  werden die freien Parameter durch Minimieren des Energieerwartungswertes für Kernmaterie bestimmt. Mit dem so bestimmten Korrelator lassen sich korrelierte Dichten und die Zustandsgleichung  $\tilde{\varepsilon}^{C2}(\rho)$  in Zweiteilchennäherung bestimmen.

Eine geeignete Parametrisierung der Korrelationsfunktion muß unmittelbar den besonderen Eigenschaften der Hard-Core-Potentiale Rechnung tragen. Innerhalb des Radius des Cores  $r_{\text{core}}$  muß die Relativwellenfunktion im Zweiteilchensystem bzw. die Zweiteilchendichte im Vielteilchensystem identisch verschwinden, da jeder Beitrag in diesem Bereich sofort eine unendliche potentielle Energie zur Folge hätte. Der Korrelator muß also dafür sorgen, daß die Wellenfunktion vollständig aus dem Bereich des Cores verdrängt wird. In der Sprache der korrelierten Wechselwirkungen muß der Core der Wechselwirkung vollständig heraustransformiert werden. Aus der Form des korrelierten lokalen Potentials  $\tilde{v}(r) = v[R_+(r)]$  wird unmittelbar klar, daß die Korrelationsfunktion  $R_+(r)$  für  $r = 0$  gerade den Wert des Coreradius  $r_{\text{core}}$  ergeben muß, um den Hard-Core vollständig aus dem korrelierten Potential zu entfernen. Der Parameter  $\eta$ , der in den Soft-Core-Parametrisierungen, wie z.B. (3.2), die Stärke des Cores widerspiegelt, muß für Hard-Core-Potentiale den Wert  $\eta = 0$  annehmen. Die vereinfachte Hard-Core-Parametrisierung lautet:

$$R_+(r) = r + \alpha \exp(-\exp[r/\beta]). \quad (4.3)$$

Der Parameter  $\alpha$  bestimmt den Wert der Korrelationsfunktion für  $r = 0$  und ist damit durch den Coreradius  $r_{\text{core}}$  festgelegt

$$R_+(r = 0) = r_{\text{core}} \quad \Rightarrow \quad \alpha = e r_{\text{core}}. \quad (4.4)$$

Verbleibt nur die Reichweite  $\beta$  als freier Parameter. Neben der speziellen Form des Ausheilens durch ein doppeltes Exponential sind eine Reihe weiterer funktionaler Abhängigkeiten denkbar, z.B. ein einfach exponentieller Abfall oder ein gaußförmiger Abfall. Unter all diesen liefert der doppeltextponentielle Abfall mit Abstand die besten, d.h. niedrigsten, Energien. Es kann jedoch nicht ausgeschlossen werden, daß optimierte Korrelationsfunktionen die Energie weiter absenken.

Die numerische Energieminimierung durch Variation des Reichweiteparameters  $\beta$  bei der Dichte  $\rho = 3 \rho_0$ , wobei  $\rho_0 = 0.17 \text{ fm}^{-3}$  die physikalische Kernmateriedichte bezeich-

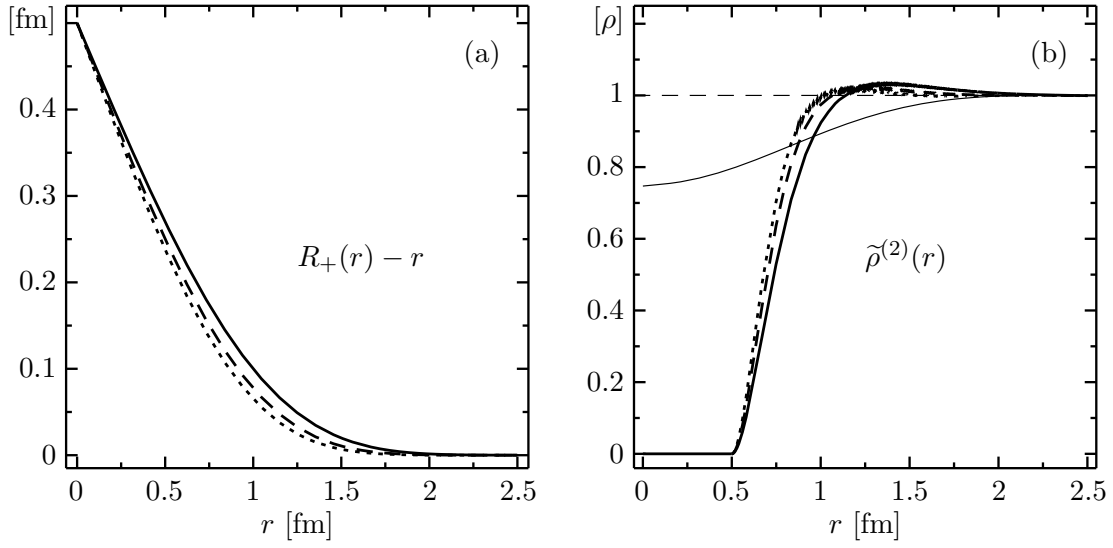


Abbildung 4.2 · (a) Korrelationsfunktionen für das GCT-Potential mit materieoptimalem Reichweiteparameter (4.5) (—) und Vergleichskorrelatoren mit verkürzten Reichweiten von  $\beta = 0.95$  fm (---) und  $\beta = 0.9$  fm (.....). (b) Korrelierte Zweiteilchendichte für  $\rho = 3\rho_0$  und unkorrelierte Zweiteilchendichte (—).

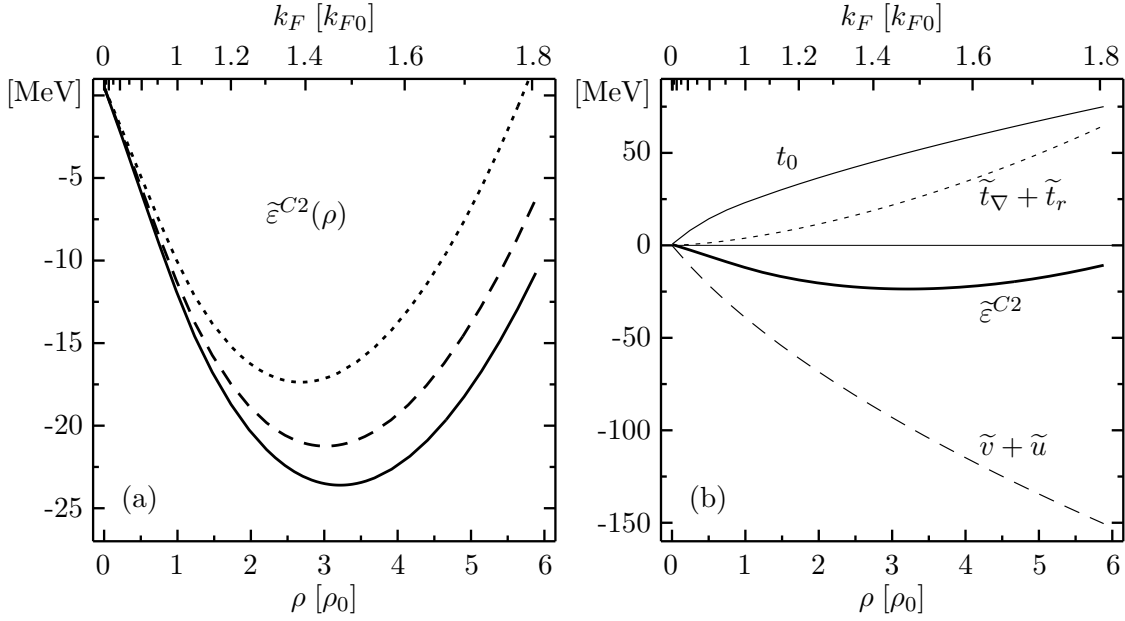


Abbildung 4.3 · (a) Abhängigkeit der Energie pro Teilchen von der Dichte für den materieoptimalen Korrelator (—) und die Vergleichskorrelatoren mit verkürzten Reichweiten von  $\beta = 0.95$  fm (---) und  $\beta = 0.9$  fm (.....). Für den materieoptimalen Korrelator wird ein Kleinheitsparameter  $\kappa \approx 0.3$  bei  $\rho \approx 4.9\rho_0$  erreicht. (b) Einzelne Beiträge zur Energie für den materieoptimalen Korrelator: unkorrelierte kinetische Energie  $t_0$  (—), lokale Potentiale  $\tilde{v} + \tilde{u}$  (---), effektive Massenkorekturen  $\tilde{t}_\nabla + \tilde{t}_r$  (.....) und die Summe aller Terme  $\tilde{\epsilon}^{C^2}$  (—).

net, liefert die Korrelatorparameter

$$\alpha = e r_{\text{core}}, \quad \beta = 1.041 \text{ fm}, \quad V_C = 0.36 \text{ fm}^3. \quad (4.5)$$

Da die gewählte Dichte, wie sich im folgenden herausstellt, praktisch der Sättigungsdichte entspricht, führt die gleichzeitige Variation der Dichte zum selben optimalen Korrelator. Die Abbildung 4.2(a) zeigt den materieoptimalen Korrelator und zwei Vergleichskorrelatoren mit verkürzten Reichweiten von  $\beta = 0.95 \text{ fm}$  bzw.  $\beta = 0.9 \text{ fm}$  und Korrelationsvolumen  $V_C = 0.3 \text{ fm}^3$  bzw.  $V_C = 0.26 \text{ fm}^3$ . In Abbildung 4.2(b) sind die korrelierten Zweiteilchendichten für die drei Korrelatoren dargestellt. Wie oben beschrieben, nehmen alle Korrelatoren für  $r = 0$  den Wert des Coreradius an, daraus folgt unmittelbar, daß die Zweiteilchendichte innerhalb des Cores identisch verschwindet.

Die Abbildung 4.3(a) gibt die Energie in Zweiteilchennäherung  $\tilde{\varepsilon}^{C2}$  als Funktion der Dichte  $\rho$  für den materieoptimalen Korrelator (4.5) und die beiden Vergleichskorrelatoren an. Hier werden Dichte bzw. Fermiimpuls in Einheiten der physikalischen Kernmateriedichte  $\rho_0 = 0.17 \text{ fm}^{-3}$  und des physikalischen Fermiimpulses  $k_{F0} = 1.36 \text{ fm}^{-1}$  angegeben. Für alle Korrelatoren ergibt sich ein ausgeprägtes Energieminimum bei  $\rho \approx 3\rho_0$ . Bei größeren Fermiimpulsen steigt die Energie entsprechend dem dominanten  $k_F^5$ -Term in (2.32) an. Der Sättigungspunkt für den materieoptimalen Korrelator resultiert aus der Energieminimierung zu

$$\rho^{\text{sat}} = 3.22 \rho_0, \quad \varepsilon^{\text{sat}} = -23.6 \text{ MeV}. \quad (4.6)$$

Der Vergleich mit den Resultaten anderer Rechnungen wird in Abschnitt 4.1.3 in aller Ausführlichkeit erfolgen.

Die Zustandsgleichung ist offenbar recht stark von der Korrelationsfunktion abhängig. Die eher geringe Reichweitenmodifikation der Vergleichskorrelatoren gegenüber dem materieoptimalen Korrelator hat eine deutliche Abweichung der Energie zur Folge. Ähnliches gilt für leicht veränderte Parametrisierungen. Wie bereits erwähnt wurden verschiedene Parametrisierungen eingesetzt von denen die hier verwendete doppeltexponentielle Darstellung die niedrigsten Energien lieferte, dennoch könnte mit anderen, nicht untersuchten Parametrisierungen eine weitere Absenkung der Sättigungsenergie in der Größenordnung von einem MeV möglich sein.

Besonders interessant ist die Untersuchung der einzelnen Beiträge zur Energie. Abbildung 4.3(b) zeigt die unkorrelierte kinetische Energie, die lokalen Potentiale und die effektiven Massenkorrekturen für den materieoptimalen Korrelator in Abhängigkeit vom Fermiimpuls. Die Struktur der Zustandsgleichung wird hier deutlich: Die unkorrelierte kinetische Energie  $t_0$  wächst proportional  $k_F^2$  an, die führenden direkten Terme der lokalen Potentiale  $\tilde{v} + \tilde{u}$  fallen proportional zu  $k_F^3$  ab und die direkten Terme der effektiven Massenkorrekturen  $\tilde{t}_\nabla + \tilde{t}_r$  wachsen mit  $k_F^5$  an. Zwischen den beiden lokalen Beiträgen von korreliertem Potential und korrelierter kinetischer Energie tritt ein deutlicher Kompensationseffekt auf, bei  $\rho = 3\rho_0$  liefert das korrelierte Potential  $\tilde{v} = -221 \text{ MeV}$  und das kinetische Potential  $\tilde{u} = 128 \text{ MeV}$ , so daß in der Summe ein lokaler Beitrag von  $-93 \text{ MeV}$  verbleibt. Die Energie, die durch Einführen der Korrelationen im Potentialteil gewonnen wird, muß zum Teil durch den Verlust beim lokalen Teil der kinetischen Energie bezahlt werden. Die Bedeutung der effektiven Massenkorrekturen für die Sättigungseigenschaften offenbart sich hier — das Anwachsen der Gesamtenergie bei großen Fermiimpulsen wird einzig von dem  $k_F^5$ -Beitrag der effektiven Massenkorrekturen verursacht. Das ist ein herausragender Unterschied zum weit verbreiteten Jastrow-Ansatz,

bei dem dieser Beitrag nicht auftritt und somit keine Sättigung in Zweiteilchenordnung erreicht werden kann. Ein quantitativer Vergleich hierzu wird in Abschnitt 4.1.3 angestellt. Der Vergleich zwischen Austausch- und direkten Termen der einzelnen Komponenten bestätigt die Beobachtung bei den Homework-Potentialen: Die Austauschtermine liefern bei den betrachteten Dichten Beiträge von 10-20%. Unabhängig vom Vorzeichen der direkten Terme sind die Austauschbeiträge allesamt negativ, daher addiert sich ihr Effekt konstruktiv und sie spielen eine wesentliche Rolle für die Gesamtenergie.

### 4.1.2 Spin-Isospinabhängiger Korrelator

Da das GCT-Potential verschiedene Radialabhängigkeiten in verschiedenen Spin-Isospinkanälen aufweist, sollte man dem Korrelator dieselbe Freiheit zu geben. Wie in Abschnitt 1.2.1 dargelegt, kann der Korrelationsoperator als Summe von Korrelatoren für die verschiedenen Quantenzahlen von Spin und Isospin multipliziert mit den entsprechenden Projektionsoperatoren geschrieben werden

$$\mathbf{C} = \sum_{S,T}^{\{0,1\}} \mathbf{C}_{ST} \mathbf{\Pi}_{ST}. \quad (4.7)$$

Die Korrelatoren  $\mathbf{C}_{ST}$  bzw. die zugehörigen Korrelationsfunktionen  $R_{+}^{ST}(r)$  werden durch die schon im spin-isospinunabhängigen Fall verwendete Parametrisierung (4.3) beschrieben. Dabei ist für jeden Spin-Isospinkanal ein Satz von Parametern  $\alpha, \beta$  einzusetzen. Der Coreradius  $r_{\text{core}}$  ist für alle Potentialkomponenten gleich, damit auch der Parameter  $\alpha = e r_{\text{core}}$ . Es verbleiben die vier Reichweiteparameter  $\beta$ , die durch Minimierung der Kernmaterieenergie bei  $\rho = 3\rho_0$  bestimmt werden. Die Ergebnisse sind in Tabelle 4.2 zusammengefaßt.

Die Abbildung 4.4(a) zeigt die Korrelationsfunktionen zu den verschiedenen Spin-Isospinquantenzahlen. Die Unterschiede in den einzelnen Kanälen sind sehr deutlich und stehen in direktem Zusammenhang mit den Radialabhängigkeiten des Potentials. Im  $ST = 00$ -Kanal z.B. besitzt die Korrelationsfunktion besonders große Reichweite und das zugehörige Potential ist auch außerhalb des Hard-Cores rein abstoßend (vergl. Abbildung 4.1). Um die Wirkung dieser zusätzlichen Abstoßung zu verringern, häuft der Korrelator die aus dem Core verdrängte Stärke nicht direkt außerhalb des Cores auf, sondern verteilt sie hin zu größeren Abständen, was sich in dem langsamen Abfallen der Korrelationsfunktion widerspiegelt. Dagegen ist es in den anderen Kanälen energetisch günstig, die verdrängte Stärke unmittelbar außerhalb des Cores zu positionieren, da so der anziehende Teil des Potentials optimal ausgenutzt werden kann. Dementsprechend sind kurzreichweitige Korrelatoren in diesen Kanälen bevorzugt.

	$\beta$ [fm]	$V_C$ [fm <sup>3</sup> ]
global	1.041	0.36
$ST = 00$	1.860	0.97
$ST = 01$	1.210	0.49
$ST = 10$	1.017	0.35
$ST = 11$	0.775	0.18

Tabelle 4.2 · Reichweiteparameter und Korrelationsvolumen des materieoptimalen Korrelators für das GCT-Potential nach Energieminimierung bei  $\rho = 3\rho_0$ . Verwendet werden die beiden Parametrisierungen (4.3) mit Spin-Isospinabhängigkeit und als globaler Korrelator.



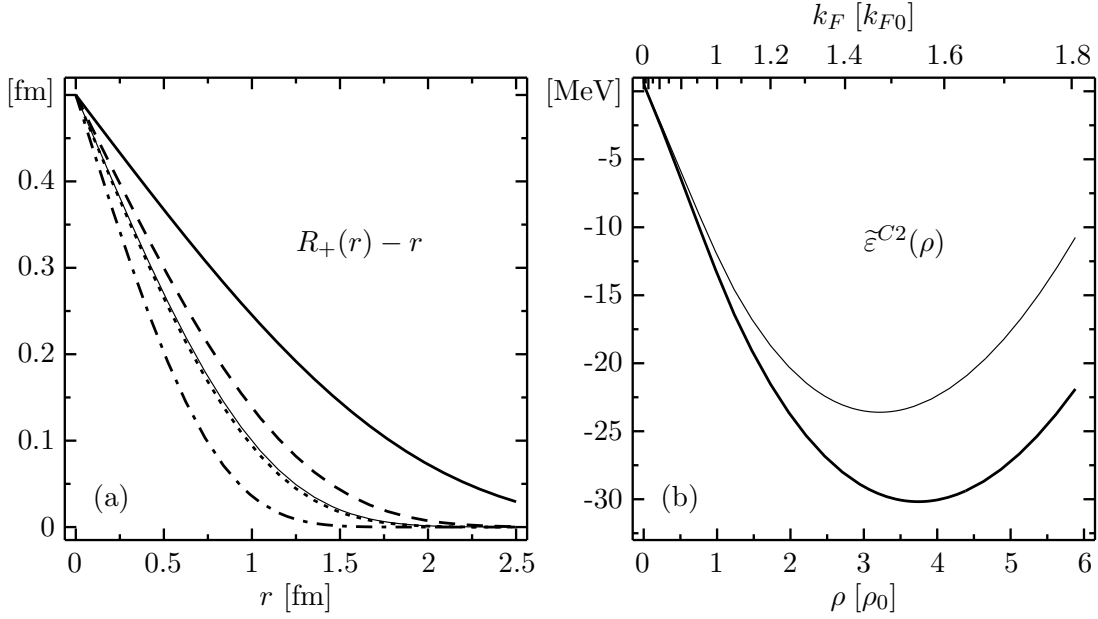


Abbildung 4.4 · (a) Materieoptimale spin-isospinabhängige Korrelationsfunktionen für das GCT-Potential. Die 4 Parameter  $\beta_{ST}$  sind durch Energieminimierung in Kernmaterie bei  $\rho = 3\rho_0$  bestimmt. Dargestellt sind die Korrelationsfunktionen für die einzelnen Spin-Isospinkanäle  $ST = 00$  (—),  $ST = 01$  (---),  $ST = 10$  (.....) und  $ST = 11$  (-.-.-). Zum Vergleich ist die materieoptimale globale Korrelationsfunktion des vorangehenden Abschnittes angegeben (—). (b) Abhängigkeit des Energieerwartungswertes pro Teilchen vom Fermiimpuls für die beiden oben genannten Korrelatoren. Bis zur Dichte  $\rho \approx 3.6\rho_0$  ist der Kleinheitsparameter  $\kappa$  kleiner als 0.3.

Die Abhängigkeit der korrelierten Energie von der Dichte für den spin-isospinabhängigen Korrelator ist in Abbildung 4.4(b) dargestellt. Zum Vergleich ist auch das Resultat für den spin-isospinunabhängigen Korrelator des vorangehenden Abschnitts angegeben. Die zusätzliche Differenzierung des Korrelators hat einen deutlichen Einfluß auf die Energie. Der Sättigungspunkt liegt bei

$$\rho^{\text{sat}} = 3.74 \rho_0, \quad \varepsilon^{\text{sat}} = -30.2 \text{ MeV} \quad (4.8)$$

und ist damit gut 6 MeV unter dem Resultat für den spin-isospinunabhängigen Korrelator. Einmal mehr zeigt sich, daß es wesentlich ist, die volle Struktur der Wechselwirkung auf den Korrelationsoperator zu übertragen.

### 4.1.3 Vergleich

Das GCT-Potential kann benutzt werden, um die allgemeinen Eigenschaften der Methode der unitären Korrelatoren für Kernmaterie mit anderen gebräuchlichen Verfahren zu vergleichen. An erster Stelle stehen hier die Jastrow-Korrelationsfunktionen [Jast55].

Der Grundgedanke der Jastrowschen Methode ist es, die kurzreichweitigen Korrelationen durch Multiplikation der Zweiteilchen-Relativwellenfunktion mit einer abstandsabhängigen Funktion  $f(r)$  zu beschreiben. Die Vielteilchen-Korrelationsfunktion ist durch das Produkt der Jastrowfunktionen für alle Teilchenpaare gegeben. Auch die jastrowkorrelierten Erwartungswerte sind im Vielteilchenfall kaum berechenbar und



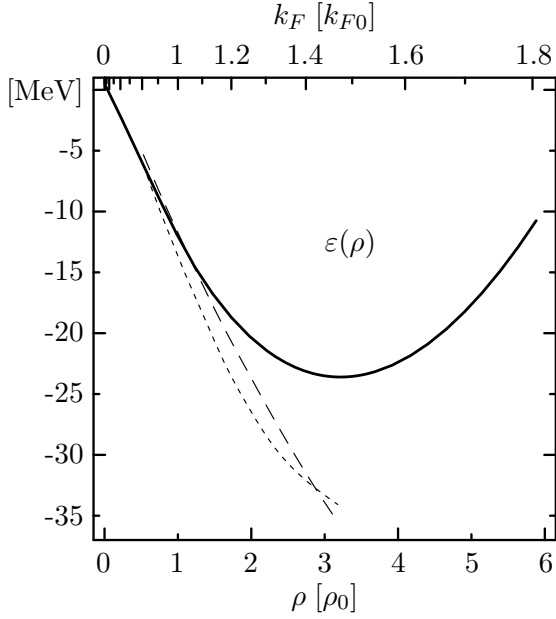


Abbildung 4.5 · Vergleich der Kernmaterieenergien berechnet mit rein zentralen Jastrow-Korrelationsfunktionen bzw. unitären Korrelatoren. Dargestellt sind UCOM-Energien in Zweiteilchennäherung mit globalem Korrelator (—) sowie die Ergebnisse einer spin-isospinunabhängigen Jastrow-Rechnung in Zweiteilchennäherung (---) [RiLo71] und Dreiteilchennäherung (-----) [RiLo72].

man ist auf eine Clusterentwicklung und deren Partialsumationen angewiesen. Eine umfassende Darstellung der Jastrowkorrelationen findet sich in [Clar79].

Wie im Falle der vorliegenden Methode ist auch für die Jastrowkorrelationen die Zweiteilchenapproximation die einfachste nichttriviale Näherung. Vergleicht man die führenden Ordnungen der  $k_F$ -Entwicklung der direkten Terme der Energien in Zweiteilchennäherung, so zeigt sich ein wesentlicher Unterschied. Die Jastrow-Methode liefert lediglich eine  $k_F^3$ -Abhängigkeit [OwBi76, RiLo71], die von den korrelierten Potentialen und der korrelierten kinetischen Energie stammt. Dagegen ergibt die Methode der unitären Korrelatoren einen  $k_F^3$ -Term für die lokalen Potentiale und einen  $k_F^5$ -Term für die effektiven Massenterme. Das hat weitreichende Konsequenzen: Für Potentiale, die eine Anziehung enthalten, ist die Jastrow-Zweiteilchennäherung per constructionem nicht in der Lage, Sättigung zu erzeugen. Der Koeffizient des führenden  $k_F^3$ -Terms ist negativ und die Energie fällt mit wachsendem Fermiimpuls immer weiter ab. Dagegen wird dieser Abfall bei den unitären Korrelatoren durch die Anstieg des  $k_F^5$ -Terms mit positivem Koeffizienten kompensiert, die Energie steigt für große Fermiimpulse stark an und bei  $\rho \approx 3.5 \rho_0$  bildet sich ein Minimum aus.

Abbildung 4.5 zeigt den direkten Vergleich der Energien in Zweiteilchennäherung für Jastrow und unitäre Korrelationen am Beispiel des GCT-Potentials. Die gezeigten Jastrow-Rechnungen von Ristig, Ter Louw und Clark [RiLo71, RiLo72] beschränken sich auf rein zentrale, spin-isospinunabhängige Korrelatoren, sie sind also direkt mit den Ergebnissen aus Abschnitt 4.1.1 für den unitären spin-isospinunabhängigen Korrelator vergleichbar. Für kleine Dichten  $\rho < \rho_0$  stimmen die Energien recht gut überein, sie fallen annähernd proportional mit der Dichte ab. Im Bereich  $\rho \approx 2 \rho_0$  zeigen die unitär korrelierten Rechnungen dann eine deutlich Abnahme der Steigung und es bildet sich das Minimum bei  $\rho \approx 3.5 \rho_0$  aus, während die Jastrow-Rechnung weiter proportional der Dichte abfällt. Die unitären Korrelatoren sind der Jastrow-Methode auf Ebene der Zweiteilchennäherung also Dank der effektiven Massenterme überlegen.

Bei Anwendung der Jastrow-Methode ist man gezwungen, zumindest die nächste Ordnung der Clusterentwicklung in Betracht zu ziehen, um Sättigung zu erhalten. Die direkten Terme der dritten Ordnung liefern einen führenden Term  $k_F^6$ , der, einen posi-

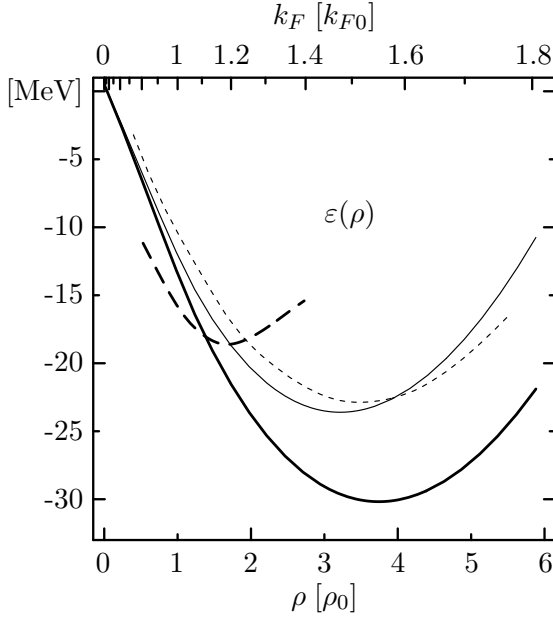


Abbildung 4.6 · Vergleich der Energien berechnet mit Hilfe der unitären Korrelatoren bzw. der Bruecknerschen G-Matrix. Dargestellt sind die UCOM-Resultate mit globalem (—) und mit spin-isospinabhängigem Korrelator (—) in Zweiteilchennäherung sowie das Ergebnis einer G-Matrixrechnung niedrigster Ordnung [BrGa58] (---) und das Resultat der unitären Transformationsmethode von Ristig et al. [RiKi68] (-----).

tiven Koeffizienten vorausgesetzt, in der Lage ist Sättigung zu erzeugen. In Abbildung 4.5 ist auch die Dreiteilchennäherung für die Jastrow-Korrelationen aufgetragen. Leider enden die Rechnungen in [RiLo72] bei  $k_F = 2.0 \text{ fm}^{-1} = 1.47 k_{F0}$ , aber es deutet sich an, daß sich ein Minimum ausbildet. Jedoch ist die Sättigungsdichte größer und die Energie deutlich geringer als für die Zweiteilchenordnung der unitären Korrelatoren. Die im Abschnitt 4.2.2 vorgestellte Rechnungen für das GT5200-Potential in [RiLo71, RiLo72] zeigen denselben Trend: Die Jastrow-Zweiteilchenordnung kollabiert und erst die Hinzunahme der Dreiteilchenordnung erzeugt Sättigung.

Neben der expliziten Berechnung der dritten Ordnung der Clusterentwicklung existieren auch Ansätze, den Kollaps der Jastrow-Zweiteilchennäherung durch zusätzliche Nebenbedingungen an die Korrelationsfunktionen einzuschränken. Ein interessanter Ansatz von Irvine [Irvi81] wird als „lowest order constrained variational technique“ (LOCV) bezeichnet. Für fermionische Systeme ist die Nebenbedingung die Normierung der korrelierten Zweiteilchenwellenfunktion bzw. Zweiteilchendichte. Die Korrelationsfunktion wird bei gegebenem Fermiimpuls  $k_F$  durch einen Satz von Differentialgleichungen bestimmt, in die das Potential und die Normierungsbedingung eingehen. Durch dieses Verfahren zeigt auch die Zweiteilchennäherung Sättigung, für das GCT-Potential ergibt sich ein Minimum bei  $\rho \approx 3\rho_0$  und einer Energie von  $\varepsilon \approx -42 \text{ MeV}$ . Die Resultate sind nicht direkt mit den hier abgeleiteten Ergebnissen vergleichbar, da Tensor Korrelationen mit einbezogen sind.

Im Vergleich mit der Methode der unitären Korrelatoren zeigen sich zwei interessante Gesichtspunkte: Zum einen ist die Normierungsnebenbedingung bei den unitären Korrelatoren per constructionem erfüllt. Für die Jastrow-Zweiteilchennäherung scheint die Normierung eine wesentliche Bedingung für die Ausbildung der Sättigung zu sein. Da dies bei den unitären Korrelatoren von vornherein gegeben ist, liefert diese Methode sowohl konzeptionell als auch technisch den wesentlich einfacheren Zugang. Zum anderen bestätigt die LOCV das Konzept der zustandsabhängigen, d.h. im einfachsten Fall dichteabhängigen, Korrelationen auf Zweiteilchenniveau zur Nachbildung der höheren Ordnungen der Clusterentwicklung. Diese Idee wurde in Abschnitt 2.1.4 bereits als Möglichkeit zur effektiven Beschreibung der Dreiteilchenbeiträge vorgestellt.

Neben den ebenfalls auf dem Variationsprinzip basierenden Jastrow-Rechnungen existiert für das GCT-Potential auch eine Rechnung mit der Bruecknerschen  $G$ -Matrix [BrGa58]. Diese Rechnung enthält implizit auch Tensorkorrelationen, so daß sie nicht unmittelbar mit den hier erzielten Resultaten vergleichbar ist, dennoch wird ein allgemeiner Trend deutlich.

Das Resultat der Brueckner-Rechnung ist zusammen mit den Ergebnissen der unitären Korrelatoren in Abbildung 4.6 dargestellt. Es zeigt sich die deutliche Diskrepanz zwischen Brueckner-Rechnungen und Variationsrechnungen in niedriger Ordnung, die in den siebziger Jahren unter dem Schlagwort „nuclear matter crisis“ bekannt geworden ist. Generell liefern die Brueckner-Rechnungen in Zweiteilchenordnung eine deutlich niedrigere Sättigungsdichte und eine geringere Bindungsenergie für Kernmaterie als die verschiedenen Variationsrechnungen in niedriger Ordnung. Dies stellt sich in erster Linie als ein Effekt der verwendeten Näherungen dar. Die Berücksichtigung der Dreiteilchenordnung der Brueckner-Methode senkt die Sättigungsenergie deutlich ab und erhöht die Dichte [Day78]. Dagegen wirkt die Dreiteilchenordnung der Variationsmethode in aller Regel gerade umgekehrt, die Sättigungsenergie steigt und die Dichte sinkt ab. Damit kommen sich die Resultate der beiden Zugänge näher. Eine ausführliche Diskussion der „nuclear matter crisis“ und ihrer Ursachen findet sich in [Day78, Clar79].

In Abbildung 4.6 ist ebenfalls ein Resultat der unitären Transformationsmethode von M. Ristig [Rist67, RiKi68, Rist70] dargestellt. Sie verfolgt denselben Ansatz eines unitären Korrelationsoperators, der eine Radialtranslation beschreibt, wie die hier vorgestellte Methode der unitären Korrelatoren. Die Grundelemente sind daher identisch, leider wurden wir auf diese frühe Arbeit erst aufmerksam, als wir die Methode bereits über den Umfang der damaligen Untersuchungen hinaus selbst neu entwickelt hatten. Dazu gehört die Verallgemeinerung auf beliebige (nicht Hard-Core-) Potentiale sowie spin-isospinabhängige Korrelatoren und die Behandlung der Dreiteilchenbeiträge. In der Abbildung ist ein Resultat mit spin-isospinunabhängigem Korrelator in Zweiteilchennäherung gezeigt. Der Grund für den leichten Unterschied der Resultate von Ristig und Kistler im Vergleich zum hier verwendeten spin-isospinunabhängigen Korrelatoren liegt einzig in der Parametrisierung der Korrelationsfunktion.

## 4.2 Gammel-Thaler-5200-Potential

Die Untersuchungen des vorangehenden Abschnitts werden nun für das Gammel-Thaler-5200-Potential (GT5200) in abgekürzter Form wiederholt. Wie bereits beschrieben unterscheidet es sich vom GCT-Potential nur in der  $ST = 10$ -Komponente, die Parameter finden sich in Tabelle 4.1. Der Zentralteil ist gegenüber dem GCT Potential abgeschwächt und der Tensorteil verstärkt, so daß die Tensorkorrelationen an Bedeutung gewinnen.

### 4.2.1 Optimale Korrelationsfunktionen

Wie für das Gammel-Christian-Thaler-Potential wird ein zustandsunabhängiger — globaler — und ein spin-isospinabhängiger Korrelator bestimmt. Neben der bisher verwendeten Hard-Core-Parametrisierung der Korrelationsfunktion (4.3) wird eine optimierte

	$R_+^A(r)$		$R_+^B(r)$	
	$\beta$	$V_C$	$\beta$	$V_C$
	[fm]	[fm <sup>3</sup> ]	[fm]	[fm <sup>3</sup> ]
global	1.143	0.44	2.961	0.43
$ST = 00$	1.860	0.97	5.109	1.05
$ST = 01$	1.210	0.49	3.044	0.46
$ST = 10$	1.357	0.59	3.475	0.58
$ST = 11$	0.775	0.18	1.878	0.14

Tabelle 4.3 · Reichweiteparameter und Korrelationsvolumen der materieoptimalen Korrelatoren für das GT5200-Potential nach Energieminimierung bei  $\rho = 1.3 \rho_0$ . Verwendet werden die beiden Parametrisierungen (4.9) mit Spin-Isospinabhängigkeit und als globaler Korrelator.

	$R_+^A(r)$		$R_+^B(r)$	
	global	$ST$	global	$ST$
$\rho^{\text{sat}} [\rho_0]$	0.74	1.29	0.81	1.45
$k_F^{\text{sat}} [k_{F0}]$	0.90	1.09	0.93	1.13
$\epsilon^{\text{sat}} [\text{MeV}]$	1.23	-0.50	1.07	-1.16

Tabelle 4.4 · Fermiimpulse, Dichten und Energien für die Sättigungspunkte für das GT5200-Potential mit den vier untersuchten Korrelatoren.

Parametrisierung mit einem dreifachen Exponential verwendet

$$\begin{aligned}
 R_+^A(r) &= r + \alpha \exp(-\exp[r/\beta]) \\
 R_+^B(r) &= r + \alpha \exp(-\exp[\exp(r/\beta)]).
 \end{aligned}
 \tag{4.9}$$

Der Parameter  $\alpha$  ist wie beim GCT-Potential durch den Radius des Cores der Wechselwirkung festgelegt

$$\alpha^A = e r_{\text{core}} \quad \text{bzw.} \quad \alpha^B = e^e r_{\text{core}}.
 \tag{4.10}$$

Der Reichweiteparameter  $\beta$  wird wie gehabt durch Minimierung der Energie bei gegebener Dichte bestimmt. In diesem Falle wird  $\rho = 1.3 \rho_0$  gewählt, weil in diesem Bereich der Sättigungspunkt erwartet wird. Wie bei allen bisher betrachteten Beispielen ist die Abhängigkeit der Korrelatorparameter von der gewählten Minimierungsdichte sehr gering. Die Resultate der Minimierung sind in Tabelle 4.3 zusammengestellt. Für den spin-isospinabhängigen Korrelator  $R_+^A$  stimmen die Parameter außer im  $ST = 10$ -Kanal mit denen für das GCT-Potential überein, denn auch die entsprechenden Potentialkomponenten sind gleich.

Mit den vier gegebenen Korrelatoren wird nun die Energie in Zweiteilchennäherung in Abhängigkeit vom Fermiimpuls berechnet. Abbildung 4.7 zeigt die Resultate. Für alle untersuchten Korrelatoren ergibt sich ein Energieminimum, dessen Energie und Dichte in Tabelle 4.4 angegeben sind. Die Kurven bestätigen die Ergebnisse der Untersuchung des GCT-Potentials. Die spin-isospinabhängigen Korrelatoren liefern eine deutlich niedrigere Energie als die globalen Korrelatoren. Hier liegen die Energien des Sättigungspunktes für die globalen Korrelatoren im positiven Bereich in der Größenordnung 1 MeV. Die spin-isospinabhängigen Korrelatoren liefern dagegen negative Energien bei  $-0.5$  bzw.  $-1.2$  MeV. Das bestätigt die Notwendigkeit den Korrelator der Struktur der Wechselwirkung anzupassen, um optimale Resultate zu erhalten.

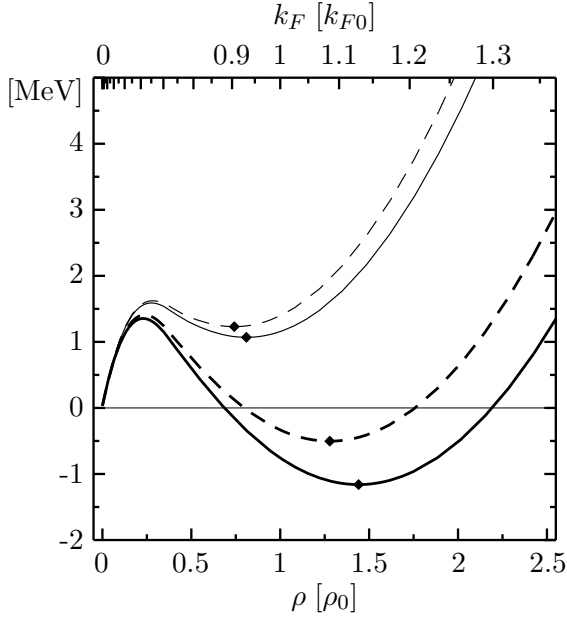


Abbildung 4.7 · Zustandsgleichung für Kernmaterie in Zweiteilchennäherung mit dem GT5200-Potential für den materieoptimalen globalen Korrelator (—) und den spin-isospinabhängigen Korrelator (---). Die Korrelationsfunktion wird durch die beiden Parametrisierungen  $R_+^A$  (---) und  $R_+^B$  (—) mit Parametern nach Tabelle 4.3 dargestellt. Die Rauten markieren die Sättigungspunkte. Der Kleinheitsparameter erreicht der Wert  $\kappa \approx 0.3$  erst bei Dichten  $\rho \approx 4\rho_0$ .

Der Vergleich der beiden Korrelatorparametrisierungen zeigt den Spielraum, der durch die Wahl der Parametrisierung verbleibt. Die beiden untersuchten Parametrisierungen unterscheiden sich lediglich in der Stärke des Abfalls bei großen Reichweiten. Die Energie am Sättigungspunkt ist für die spin-isospinabhängige Variante der Parametrisierung  $R_+^B$  um gut 0.6 MeV niedriger als für die Parametrisierung  $R_+^A$ . Es ist nie auszuschließen, daß eine andere „geratene“ Parametrisierung existiert, die die Energie in dieser Größenordnung absenkt. Um diese Unsicherheit zu beseitigen, wäre es nötig, eine optimale Korrelationsfunktion etwa durch eine entsprechende Differentialgleichung zu bestimmen, was für den zweiteilchenoptimalen Korrelator auch möglich, jedoch für den materieoptimalen Korrelator zu komplex ist.

### 4.2.2 Vergleich mit Jastrow-Rechnungen

Das GT5200-Potential ist auch in den bereits zitierten Arbeiten von M.L. Ristig, W.J. Ter Louw und J.W. Clark [RiLo71, RiLo72] behandelt worden. Der Vorteil gegenüber dem bereits diskutierten GCT-Potential liegt darin, daß die Rechnung von Ristig et al. den Sättigungspunkt und das Verhalten bei Dichten jenseits der Sättigung zeigt, so daß der direkte Vergleich möglich ist.

Die Abbildung 4.8 zeigt die Energien mit der globalen und spin-isospinabhängigen Version der Korrelatorparametrisierung  $R_+^B$  und zum Vergleich die Ergebnisse der zustandsunabhängigen Jastrow-Rechnung in Zwei- und Dreiteilchennäherung. Diese Rechnungen sind direkt mit den Resultaten mit dem globalen Korrelator zu vergleichen, da in beiden Fällen keine Spin-Isospinabhängigkeit berücksichtigt wird.

Es bestätigen sich die Schlußfolgerungen die bei Untersuchung des GCT-Potentials in Abschnitt 4.1.3 gezogen wurden. Im Gegensatz zu den Jastrow-Rechnungen zeigen die UCOM-Rechnungen bereits in Zweiteilchennäherung Sättigungsverhalten, d.h. es bildet sich ein Minimum in der Energie bei endlichen Fermiimpulsen bzw. Dichten aus und die Energie wächst bei großen Fermiimpulsen stark — in führender Ordnung mit  $k_F^5$ , dem Beitrag der effektiven Massenkorekturen — an. Die Jastrow-Rechnungen kollabieren dagegen in Zweiteilchennäherung, die Energie fällt immer weiter ab — in führender

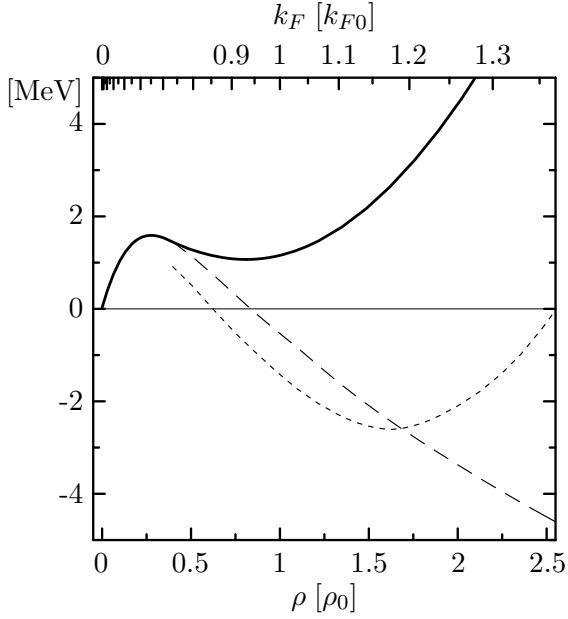


Abbildung 4.8 · Vergleich der Energien für das GT5200-Potential mit rein zentralen Korrelatoren. Dargestellt sind UCOM-Energien in Zweiteilchennäherung mit globalem Korrelator  $R_+^B$  (—) sowie die Ergebnisse einer spin-isospinunabhängigen Jastrow-Rechnung in Zwei- (---) [RiLo71] und Dreiteilchennäherung (-----) [RiLo72].

Ordnung mit  $k_F^3$ , dem Beitrag des lokalen Potentials. Es bildet sich kein Minimum aus. Erst die Hinzunahme der nächsten Ordnung der Clusterentwicklung, ergibt den nötigen  $k_F^6$ -Term um Sättigung zu realisieren. Der in Jastrow-Dreiteilchennäherung bestimmte Sättigungspunkt liegt um etwa 4 MeV unter dem der UCOM-Zweiteilchennäherung. Es ist zu erwarten, daß die Berücksichtigung der Dreiteilchenbeiträge für die unitären Korrelatoren bei niedrigen Dichten eine Absenkung der Energie bewirkt, da der Dreiteilchenbeitrag des Potentials — proportional  $k_F^6$  — ersten Rechnungen zufolge negativ ist. Die kinetischen Terme, insbesondere der Beitrag der effektiven Massenkorrekturen mit einer  $k_F^8$ -Abhängigkeit sollte bei Dichten jenseits des Sättigungspunktes einen dominanten positiven Energiebeitrag bringen, so daß wieder Sättigung erreicht wird.

## Kapitel 5

---

# Bosonische Materie: $^4\text{He}$ -Flüssigkeit

Nachdem in den vorangehenden Kapiteln die Anwendung der Methode der unitären Korrelatoren auf homogene fermionische Systeme am Beispiel von Kern- und Neutronenmaterie untersucht wurde, soll der gesamte Formalismus in diesem und im folgenden Kapitel auf bosonische Systeme übertragen werden. Als Anwendung bieten sich Systeme von  $^4\text{He}$ -Atomen an, da die Atom-Atom-Wechselwirkung hier recht gut bekannt und von einfacher Struktur ist. Zudem ist der Einfluß der kurzreichweitigen Korrelationen in diesen Systemen noch weit stärker ausgeprägt als in der bisher diskutierten nuklearen Materie. Es handelt sich um eine Paradeobjekt für den Test der Methode der unitären Korrelatoren im Grenzfall starker Korrelationen. In einem ersten Schritt diskutiert dieses Kapitel ein homogenes System von  $^4\text{He}$ -Atomen, die  $^4\text{He}$ -Flüssigkeit.

### 5.1 Motivation

Die Behandlung von Systemen wechselwirkender  $^4\text{He}$ -Atome im Rahmen der Methode der unitären Korrelatoren weist im Vergleich zur Beschreibung nuklearer Materie zwei wesentliche Unterschiede auf — es handelt sich um ein *von Korrelationen dominiertes* System wechselwirkender *Bosonen*.

Das  $^4\text{He}$ -Atom besitzt Gesamtspin Null und ist somit ein Boson. Um dieses zusammengesetzte Objekt als inertes Boseteilchen beschreiben zu können, dürfen die intrinsischen Freiheitsgrade des  $^4\text{He}$ -Atoms nicht angeregt werden. Die mittlere Energie pro Teilchen muß wesentlich unter der niedrigsten Energie für eine intrinsische Anregung des Atoms bleiben. Unter dieser Voraussetzung kann die  $^4\text{He}$ -Flüssigkeit als System strukturloser identischer Bosonen mit einer gegebenen Atom-Atom-Wechselwirkung behandelt werden.

Der Übergang zu bosonischen Systemen im Grundzustand bringt, verglichen mit den Fermigasen, Vor- und Nachteile für die theoretische Behandlung mit sich, die mit der besonderen Struktur des Vielteilchenzustandes verknüpft sind: Bei  $T = 0\text{ K}$  befinden sich alle Teilchen im selben Einteilchenzustand (Bose-Einstein-Kondensat). Der Vielteilchenzustand ist einfach durch das direkte Produkt der identischen Einteilchenzustände gegeben. Die für Bosonen notwendige Symmetrie gegenüber Permutationen der Einteilchenzustände ist damit trivial gewährleistet. Daraus ergeben sich zunächst einige technische Vorteile. Wegen der besonderen Struktur des Vielteilchenzustandes

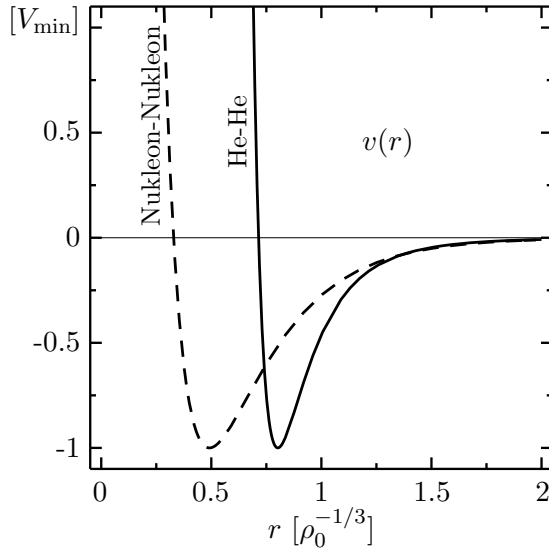


Abbildung 5.1 · Radialabhängigkeit des Lennard-Jones-Potentials (—) und des Malfliet-Tjon-V-Potentials (---). Die Längenskala ist in Einheiten des mittleren Teilchenabstandes in flüssigem  $^4\text{He}$  bzw. in Kernmaterie gegeben. Die Energieskala ist auf die Energie des Potentialminimums normiert.

vereinfacht sich auch die analytische Form von Erwartungswerten und Matrixelementen deutlich. Es treten nur die direkten Terme auf, deren Berechnung sich zudem stark vereinfacht. Die Zustandsgleichung des Bosegases bei  $T = 0\text{ K}$  ist von sehr einfacher Struktur.

Die besondere Struktur des Vielteilchenzustandes ist auch Ursache für einige Erschwernisse bei der Beschreibung des Bosegases durch die Methode der unitären Korrelatoren. Die Korrelationen spielen in den bosonischen Systemen eine weit dominantere Rolle als in Fermigasen, weil die Dichte wegen des fehlenden Pauliprinzips bei gleicher Wechselwirkung viel größer ist. Da es kein Austauschloch im unkorrelierten Zustand gibt, ist die kurzreichweitige Unterdrückung der Zweiteilchendichte allein durch die Wechselwirkung bestimmt und muß durch den unitären Korrelator erzeugt werden. Außerdem wird sich zeigen, daß die Sättigung nicht mehr wie im Fermigas in Zweiteilchennäherung beschrieben werden kann.

Die Atom-Atom-Wechselwirkung für Heliumisotope ist wesentlich einfacher und sehr viel besser bekannt als die Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung. Es handelt sich um ein rein zentrales Potential mit dem Charakter einer van-der-Waals-Wechselwirkung. Es existieren eine Reihe verschiedener Potentialmodelle, deren Diskrepanzen im Vergleich zu den Unsicherheiten bei der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung jedoch minimal sind. Die Potentiale werden an Daten, wie z.B. Dispersionskoeffizienten, Viskositäten und thermische Leitfähigkeiten, aus Experimenten in der Gasphase oder in Atomstrahlen fixiert. Das bekannteste „historische“ Potential ist das Lennard-Jones-6-12-Potential [BeKe81]

$$v(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (5.1)$$

$$\epsilon = 10.22\text{ K}, \quad \sigma = 2.556\text{ \AA},$$

das im folgenden verwendet werden soll. Es existieren eine Vielzahl von modernen He-He-Potentialen mit hoher Genauigkeit, z.B. das Aziz-HFDHE2-Potential [AzNa79]. Die Unterschiede zum Lennard-Jones-Potential sind aber so gering, daß sie für die hier vorgestellten Untersuchungen keine Rolle spielen.

Bereits die Form des Potentials gibt ein deutliches Indiz für die große Bedeutung der



kurzreichweitigen Korrelationen in der  $^4\text{He}$ -Flüssigkeit. Um das zu verdeutlichen wird das Lennard-Jones-Potential einem schematischen Nukleon-Nukleon-Potential, hier dem Malfiet-Tjon-V-Potential [MaTj69], gegenübergestellt. Die Abbildung 5.1 zeigt die beiden Potentiale, wobei die Abstandskoordinate in Einheiten des mittleren Teilchenabstandes in flüssigem  $^4\text{He}$  ( $\rho_0^{-1/3} = 3.58\text{\AA}$ ) bzw. Kernmaterie ( $\rho_0^{-1/3} = 1.8\text{ fm}$ ) aufgetragen ist. Die Energieskala ist auf die Energie des Potentialminimums normiert. In dieser Darstellung fallen die äußeren anziehenden Bereiche der Potentiale zusammen. Es zeigt sich, daß der Coreradius des Lennard-Jones-Potentials relativ zum anziehenden Bereich um einen Faktor zwei größer ist als für ein typisches NN-Potential. Das Korrelationsvolumen ist damit etwa achtmal größer als in Kernen. Die He-Systeme werden also viel stärker von den coreinduzierten kurzreichweitigen Korrelationen dominiert als nukleare Systeme.

Der bosonische Vielteilchenzustand zusammen mit dem dominanten Core der Wechselwirkung machen die  $^4\text{He}$ -Flüssigkeit zum Härtetest für die Methode der unitären Korrelatoren im Grenzfall starker Korrelationen. Die im folgenden angestellten Untersuchungen dieser korrelationsdominierten Systeme bestätigen dennoch den weiten Anwendungsbereich der Methode der unitären Korrelatoren.

## 5.2 Stark wechselwirkendes Bosegas

### 5.2.1 Versuchszustand

Vom formalen Standpunkt ist das wechselwirkende Bosegas im Rahmen der Methode der unitären Korrelatoren wesentlich einfacher zu behandeln als das Fermigas. Die Philosophie ist dieselbe wie die in Abschnitt 2.1.1 für das Fermigas dargelegte: Der Zustand des wechselwirkenden Systems ist durch den Zustand des freien Gases und den unitären Korrelator dargestellt. Der Einfluß der Wechselwirkung wird komplett durch den Korrelationsoperator beschrieben, er bringt die durch die Wechselwirkung induzierten Korrelationen in den unkorrelierten Vielteilchenzustand ein.

Wieder wird das unendliche System aus einem System mit endlichem Volumen  $V$  und Teilchenzahl  $N$  durch den Grenzübergang  $N, V \rightarrow \infty$ , wobei  $\rho = N/V = \text{const}$ , konstruiert. Für das wechselwirkungsfreie Bosegas im Grundzustand ( $T = 0\text{ K}$ ) befinden sich alle Teilchen im selben quantenmechanischen Einteilchenzustand, es liegt ein reines Bose-Einstein-Kondensat vor. Der Einteilchenzustand ist durch eine konstante normierte Wellenfunktion innerhalb des Volumens gekennzeichnet

$$\langle \vec{x} | \psi_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}}. \quad (5.2)$$

Der Vielteilchenversuchszustand, d.h. der Grundzustand des freien Bosegases, ist durch das direkte Produkt aus  $N$  dieser Einteilchenzustände gegeben

$$|\Psi_0\rangle = \underbrace{|\psi_0\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_0\rangle}_{N \text{ Zustände}}. \quad (5.3)$$

Die Permutationssymmetrie für Bosonen ist trivial gewährleistet.

### 5.2.2 Erwartungswerte und Zustandsgleichung

Die Berechnung der korrelierten Erwartungswerte vereinfacht sich für diesen Versuchszustand im Vergleich zu fermionischer Materie drastisch. Die erste Vereinfachung ergibt sich daraus, daß alle Erwartungswerte von Operatoren, die Impuls- bzw. Ableitungsoperatoren enthalten, verschwinden. Das heißt z.B. für den korrelierten Hamiltonoperator in Zweiteilchennäherung (2.1)

$$\tilde{\mathbf{H}}^{C2} = \mathbf{T} + \tilde{\mathbf{V}} + \tilde{\mathbf{U}} + \tilde{\mathbf{T}}_{\nabla} + \tilde{\mathbf{T}}_r, \quad (5.4)$$

daß die unkorrelierte kinetische Energie  $\mathbf{T}$  und die effektiven Massenkorrekturen für den Gradiententeil  $\tilde{\mathbf{T}}_{\nabla}$  und den Radialteil  $\tilde{\mathbf{T}}_r$  nicht beitragen

$$\langle \mathbf{T} \rangle = 0, \quad \langle \tilde{\mathbf{T}}_{\nabla} \rangle = 0, \quad \langle \tilde{\mathbf{T}}_r \rangle = 0. \quad (5.5)$$

Zur Zustandsgleichung in Zweiteilchennäherung, d.h. zur Energie pro Teilchen in Abhängigkeit von der Dichte, tragen nur die lokalen Terme, d.h. das korrelierte Potential  $\tilde{\mathbf{V}}$  und der lokale Teil der korrelierten kinetischen Energie  $\tilde{\mathbf{U}}$ , bei. Mit den bereits im vorangehenden Teil verwendeten Bezeichnungen für die Erwartungswerte pro Teilchen

$$\tilde{v} = \langle \tilde{\mathbf{V}} \rangle / N, \quad \tilde{u} = \langle \tilde{\mathbf{U}} \rangle / N \quad (5.6)$$

lautet die Zustandsgleichung in Zweiteilchennäherung

$$\tilde{\varepsilon}^{C2}(\rho) = \tilde{v} + \tilde{u}. \quad (5.7)$$

Eine zweite Vereinfachung ergibt sich bei der Berechnung der Erwartungswerte selbst. Da der Vielteilchenversuchszustand als direktes Produkt von Einteilchenzuständen dargestellt ist, treten keine Austauschterme in den Erwartungswerten auf. Es existiert lediglich der direkte Term. Formal lassen sich die Erwartungswerte für bosonische Materie aus denen für das Fermigas gewinnen, indem der Grenzübergang  $\lambda \rightarrow \infty$  in den mit der Dichte dargestellten Fermigas-Erwartungswerten gebildet wird. Die Austauschterme enthalten einen Faktor  $1/\lambda$  und streben somit gegen Null. Anschaulich bedeutet der Übergang zu unendlichem Entartungsgrad, daß im Grundzustand alle Teilchen den niedrigsten Einteilchenzustand besetzen. Das war gerade die Annahme bei der Konstruktion des bosonischen Versuchszustandes. Für den Erwartungswert des lokalen Potentials  $\tilde{v}$  (analog für  $\tilde{u}$ ) gilt einfach

$$\tilde{v} = \frac{\rho}{2} \int d^3r \tilde{v}(r). \quad (5.8)$$

Die Zustandsgleichung in Zweiteilchennäherung ist proportional zur Dichte  $\rho$

$$\tilde{\varepsilon}^{C2}(\rho) = \frac{\rho}{2} \int d^3r (\tilde{v}(r) + \tilde{u}(r)) = (C_v^{[2]} + C_u^{[2]}) \rho, \quad (5.9)$$

mit

$$C_v^{[2]} = \frac{1}{2} \int d^3r \tilde{v}(r) \quad (5.10)$$

und entsprechendem Integral für  $C_u^{[2]}$ . Bereits hier wird deutlich, daß die Zweiteilchennäherung für das wechselwirkende Bosegas keine Sättigung erzeugen kann. Für ein anziehendes Potential ist die Proportionalitätskonstante im allgemeinen negativ, so daß

die Energie mit wachsender Dichte abfällt — das System kollabiert. Für das Fermigas waren die effektiven Massenkorrekturen mit ihrer  $\rho^{5/3}$ -Abhängigkeit für das Erzeugen der Sättigung verantwortlich. Für das Bosegas tragen sie aber wegen des räumlich konstanten Versuchszustandes nicht bei.

Diese formalen Erwägungen zeigen, das es notwendig ist, über die Zweiteilchennäherung hinauszugehen. Der erste Schritt ist die Hinzunahme der höheren Ordnungen der Clusterentwicklung. In Dreiteilchenordnung und allen höheren Ordnungen tragen immer nur die lokalen Komponenten des korrelierten Hamiltonoperators bei, je nach ihrem Ursprung aus dem korrelierten Potential bzw. der korrelierten kinetischen Energie werden sie in der  $n$ -ten Clusterordnung mit  $\tilde{v}^{[n]}$  bzw.  $\tilde{u}^{[n]}$  bezeichnet. Die Zustandsgleichung in Dreiteilchennäherung lautet

$$\tilde{\varepsilon}^{C3}(\rho) = \tilde{\varepsilon}^{C2}(\rho) + \tilde{v}^{[3]} + \tilde{u}^{[3]}. \quad (5.11)$$

Dabei ist der Erwartungswerte  $\tilde{v}^{[3]}$  des Dreiteilchenbeitrags des korrelierten Potentials durch

$$\tilde{v}^{[3]} = \frac{\rho^2}{6} \int d^3x_1 d^3x_2 \tilde{v}^{[3]}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, 0) \quad (5.12)$$

gegeben. Der Dreiteilchenbeitrag zur Zustandsgleichung ist also proportional zum Quadrat der Dichte; es gilt

$$\tilde{\varepsilon}^{C3}(\rho) = (C_v^{[2]} + C_u^{[2]}) \rho + (C_v^{[3]} + C_u^{[3]}) \rho^2 \quad (5.13)$$

mit

$$C_v^{[3]} = \frac{1}{6} \int d^3x_1 d^3x_2 \tilde{v}^{[3]}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, 0) \quad (5.14)$$

und entsprechendem Integral für  $C_u^{[3]}$ . Für die Bestimmung der Radialabhängigkeiten der Dreiteilchenanteile des korrelierten Potentials  $\tilde{v}^{[3]}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3)$  und des lokalen Teils der korrelierten kinetischen Energie  $\tilde{u}^{[3]}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3)$  sind, wie in Abschnitt 2.1.3 ausgeführt, weitere Näherungen wie die Produktnäherung oder die verallgemeinerte Koordinatentransformation (siehe Abschnitt 1.4) nötig. Hier wird ausschließlich die verallgemeinerte Koordinatentransformation verwendet, da sie sich in den Rechnungen zum Fermigas als physikalisch besser motivierte Näherung erwiesen hat.

Die allgemeine Struktur der Zustandsgleichung in beliebiger Ordnung der Clusterentwicklung läßt sich bereits ablesen. Die Zustandsgleichung in  $n$ -Teilchennäherung ist ein Polynom in der Dichte  $\rho$  von der Ordnung  $n - 1$

$$\tilde{\varepsilon}^{Cn}(\rho) = \sum_{i=2}^n (\tilde{v}^{[i]} + \tilde{u}^{[i]}) = \sum_{i=2}^n (C_v^{[i]} + C_u^{[i]}) \rho^{i-1}. \quad (5.15)$$

Die Koeffizienten sind durch die Integrale über die Radialabhängigkeiten der lokalen Terme der entsprechenden Clusterordnung gegeben.

### 5.2.3 Effektive Korrekturen zur Zweiteilchennäherung

Obwohl sich die Berechnung der Dreiteilchenterme der Clusterentwicklung für das Bosegas wesentlich einfacher gestaltet als für das Fermigas, ist es in einigen Anwendungen

trotzdem von Interesse, die Beiträge jenseits der Zweiteilchennäherung im Rahmen einer effektiven Korrektur zu beschreiben. Für das Fermigas wurden bereits zwei einfache Ansätze hierzu diskutiert: Der dichteabhängige Korrelator in Abschnitt 2.1.4 und die Dreiteilchen-Kontaktwechselwirkung in Abschnitt 2.1.5.

Die Formulierung einer Dreiteilchen-Kontaktwechselwirkung der Form (2.51)

$$v_\delta(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3) = \Gamma \delta^{(3)}(\vec{r}_{12}) \delta^{(3)}(\vec{r}_{13}) \delta^{(3)}(\vec{r}_{23}) \quad (5.16)$$

bietet im Falle des Bosegases gegenüber der exakten Berechnung der Dreiteilchenordnung keine Vorteile. Der Erwartungswert dieser Wechselwirkung für den Grundzustand des Bosegases ist proportional dem Quadrat der Dichte. Für die Energie in Zweiteilchennäherung mit Korrektur durch die Dreiteilchen-Kontaktwechselwirkung gilt

$$\hat{\varepsilon}^{C2\delta} = \hat{\varepsilon}^{C2} + v_\delta = \hat{\varepsilon}^{C2} + \Gamma \rho^2. \quad (5.17)$$

Dies entspricht exakt dem Energieerwartungswert der Dreiteilchennäherung, wenn die Stärke  $\Gamma = C_v^{[3]} + C_u^{[3]}$  gewählt wird, so daß sich keine Vereinfachungen gegenüber der direkten Berechnung der Dreiteilchenbeiträge ergeben. Die Dreiteilchenwechselwirkung ist lediglich von Nutzen, wenn der Stärkeparameter an experimentellen Daten oder an unabhängigen Ergebnissen anderer Rechnungen, z.B. mit Monte Carlo-Methoden, fixiert wird. Aber selbst dann stellt diese effektive Beschreibung der Beiträge jenseits der Zweiteilchennäherung nur eine Korrektur der Energieerwartungswerte dar, der Einfluß der höheren Clusterordnungen auf andere Observablen kann nicht behandelt werden.

Die Einführung eines dichteabhängigen Korrelators bietet dagegen dieselben Vorteile wie im Falle des Fermigases. Die Erwartungswerte für alle korrelierten Observablen können konsistent durch Einsetzen einer dichteabhängigen Korrelationsfunktion  $R_+(r, \rho)$  in die Ausdrücke der Zweiteilchennäherung bestimmt werden. Die Dichteabhängigkeit wird in der Parametrisierung des Korrelators durch Skalierung aller Parameter mit der Dimension einer Länge mit einem dichteabhängigen Faktor  $\xi(\rho)$  realisiert.

Die Wahl dieser Skalierungsfunktion orientiert sich an der Struktur der Zustandsgleichung des betreffenden Systems. Am einfachsten ist dies am Beitrag des korrelierten Potentials zu erkennen. Wie bereits für den direkten Term des Potentialerwartungswertes für das Fermigas diskutiert, läßt sich der Erwartungswert umformen zu

$$\tilde{v}(\rho) = \frac{\rho}{2} \int d^3r v[R_+(r, \rho)] = \frac{\rho}{2} \xi^3(\rho) \int d^3r v[\xi(\rho) R_+(r)]. \quad (5.18)$$

Für das Bosegas erweist sich eine Skalierungsfunktion mit einer linearen Dichteabhängigkeit als optimal

$$\xi(\rho) = 1 - \gamma \rho. \quad (5.19)$$

Analytisch läßt sich diese spezielle Form der Dichteabhängigkeit durch die Struktur des korrelierten Potentialerwartungswertes motivieren. Die Taylorentwicklung des Erwartungswertes in der Dichte  $\rho$  bzw. dem Stärkeparameter  $\gamma$  um den Nullpunkt ergibt mit obiger Skalierungsfunktion

$$\tilde{v}(\rho) = \frac{\rho}{2} \sum_{n=0}^{\infty} (\gamma \rho)^n \int d^3r f_n(r) \quad (5.20)$$

mit

$$\begin{aligned} f_0(r) &= v[R_+(r)] \\ f_1(r) &= -3v[R_+(r)] - R_+(r)v'[R_+(r)] \\ f_2(r) &= 3v[R_+(r)] + 3R_+(r)v'[R_+(r)] + \frac{1}{2}R_+^2(r)v''[R_+(r)]. \end{aligned} \quad (5.21)$$

In der nullten Ordnung ergibt sich gerade der Erwartungswert des dichteunabhängig korrelierten Potentials (5.8), der proportional der Dichte und unabhängig vom Stärkeparameter ist. Die erste Ordnung der Entwicklung liefert einen dem Quadrat der Dichte proportionalen Term, der strukturell dem Beitrag der dritten Clusterordnung entspricht. Ferner ist dieser Term proportional zum Stärkeparameter  $\gamma$ , der also ein Maß für den Beitrag der effektiven Dreiteilchenbeiträge ist. Die zweite Ordnung der Entwicklung liefert Terme proportional zur dritten Potenz der Dichte und zum Quadrat des Stärkeparameters, der als effektive Beschreibung der Beiträge der Vierteilchenclusterordnung verstanden werden kann. Für die höheren Ordnungen gilt entsprechendes. Folglich liefert der dichteabhängige Korrelator mit der durch (5.19) gegebenen Form der Dichteabhängigkeit in allen Ordnungen der Clusterentwicklung Beiträge zur Energie. Die Koeffizienten hängen nur von der (dichteunabhängigen) Korrelationsfunktion, dem Potential und dessen Ableitungen ab. Die Beiträge jenseits der Zweiteilchenordnung sind mit entsprechenden Potenzen des Stärkeparameters gewichtet, so daß das dimensionslose Produkt  $\gamma\rho$  ein Maß für die Relevanz der höheren Ordnungen ist.

Die so generierte Struktur der Zustandsgleichung mit dichteabhängigem Korrelator in Zweiteilchennäherung stellt eine wesentliche Verbesserung der Zweiteilchennäherung dar, da sie nicht nur den Term der Dreiteilchenordnung sondern auch alle höheren Ordnungen der Clusterentwicklungen simuliert. In Abschnitt 5.3.4 wird die Anwendung auf das Lennard-Jones-Potential demonstriert.

## 5.3 Flüssiges $^4\text{He}$ und Lennard-Jones-Potential

Am Beispiel des Lennard-Jones-Potentials wird in den folgenden Abschnitten die Zustandsgleichung des Bosegases im Rahmen der Methode der unitären Korrelatoren diskutiert. Wie bereits mehrfach exerziert, ist der erste Schritt die Bestimmung einer optimalen Korrelationsfunktion.

### 5.3.1 Optimaler Korrelator I

Bereits bei der Behandlung des Fermigases in den vorangehenden Abschnitten wurde diskutiert, daß es zwei Konzepte zur Bestimmung einer optimalen Korrelationsfunktion gibt: Die Ableitung aus Eigenschaften des Zweiteilchensystems und die Bestimmung im Vielteilchensystem. Im Falle des Fermigases mit rein abstoßendem Homework-1-Potential ergab sich ein deutlicher Unterschied zwischen *zweiteilchenoptimalem* und *materieoptimalem* Korrelator. Für das Bosegas sind diese beiden Korrelatoren jedoch per Constructionem identisch.

Um dies zu zeigen, sei die Bestimmung des optimalen Korrelators durch Energieminimierung im Zwei- bzw. Vielteilchensystem betrachtet. Der Grundzustand ( $T = 0\text{ K}$ ) des Bosegase erlaubt es, als Einteilchenversuchswellenfunktion eine Konstante (5.2) zu wählen. Im Energieerwartungswert verschwinden damit alle kinetischen Terme und in

Zweiteilchennäherung verbleibt lediglich der Erwartungswert eines lokalen Zweiteilchenpotentials. Der Energieerwartungswert für ein System mit Teilchenzahl  $N$  in Zweiteilchennäherung lautet

$$E^{C2} = \langle \mathbf{H}^{C2} \rangle = \frac{N(N-1)}{2V} \int d^3r [\tilde{v}(r) + \tilde{u}(r)]. \quad (5.22)$$

Um den Materieerwartungswert (5.7) bzw. (5.8) darzustellen muß lediglich der Limes  $V, N \rightarrow \infty$  mit  $\rho = N/V$  gebildet werden. Der Korrelator beeinflusst nur den Integranden dieses Ausdrucks, denn die beiden lokalen Terme  $\tilde{v}(r)$  und  $\tilde{u}(r)$  sind Funktionale der Korrelationsfunktion. Offenbar unterscheidet sich der Energieerwartungswert für Materie und für das Zweiteilchensystem nur im Vorfaktor, die auftretenden Integrale sind identisch. Da der Korrelator nur diese Integrale beeinflusst, folgt unmittelbar, daß die Variation des Korrelators bei beliebiger Teilchenzahl immer zur selben optimalen Korrelationsfunktion führen muß. Der zweiteilchenoptimale und der materieoptimale Korrelator sind also identisch.

Für das Fermigas führt der komplexere Versuchszustand — eine Slaterdeterminante aus ebenen Wellen mit Impulsen bis zum Fermiimpuls  $k_F$  — dazu, daß auch die kinetischen Terme beitragen und so Terme mit anderer Teilchenzahlabhängigkeit ins Spiel kommen. Der optimale Korrelator ist somit nicht unabhängig von der Teilchenzahl oder der Dichte. Insbesondere ist der Korrelator, der im Zweiteilchensystem mit konstanter Ansatzfunktion durch Energieminimierung bestimmt wurde, nicht mit dem Korrelator, der durch Minimierung der Materieenergie mit einer Slaterdeterminante als Versuchszustand definiert ist, vergleichbar.

Der optimale Korrelator im Variationssinne soll nun für das Lennard-Jones-Potential bestimmt werden. Die Korrelationsfunktion wird mit der bereits erprobten Parametrisierung

$$R_+(r) = r + \alpha (r/\beta)^\eta \exp[-\exp(r/\beta)] \quad (5.23)$$

dargestellt. Die Energie, bzw. das teilchenzahlunabhängige Integral in (5.22), wird durch Variation der Korrelatorparameter  $\alpha, \beta$  und  $\eta$  minimiert. Es ergeben sich die Werte

$$\alpha = 6.267 \text{ \AA}, \quad \beta = 3.520 \text{ \AA}, \quad \eta = 0.052, \quad (5.24)$$

woraus sich ein Korrelationsvolumen von  $V_C = 46.4 \text{ \AA}^3$  ergibt. Diese Parameter werden in den folgenden Berechnungen verwendet.

Die bisherige Diskussion des optimalen Korrelators für das Bosegas basiert auf der Zweiteilchennäherung und läßt höhere Terme der Clusterentwicklung unberücksichtigt. Es wurde stillschweigend davon ausgegangen, daß diese Näherung gerechtfertigt ist, obwohl bereits vom analytischen Standpunkt gezeigt wurde, daß die Zweiteilchennäherung für die Beschreibung des Bosegases sicher nicht ausreichend ist. Allgemein gilt die Philosophie, daß der optimale Korrelator stets in der Näherung zu bestimmen ist, die auch in den späteren Rechnungen Verwendung findet. Das heißt, der hier bestimmte Korrelator in Zweiteilchennäherung ist nur für Rechnungen in Zweiteilchennäherung bzw. darauf basierenden effektiven Erweiterungen gültig. Für Rechnungen in Dreiteilchennäherung existiert ein anderer optimaler Korrelator, der durch Energieminimierung in Dreiteilchennäherung zu bestimmen ist. Praktisch ist die Energieminimierung in Dreiteilchennäherung jedoch zu aufwendig, weshalb auf den optimalen Korrelator in Zweiteilchennäherung zurückgegriffen wird.

### 5.3.2 Optimaler Korrelator II

Für die Bestimmung des optimalen Korrelators im Zweiteilchensystem gibt es neben der Energieminimierung eine zweite Möglichkeit, die hier kurz dargestellt werden soll.

Die Grundmotivation für die Einführung des unitären Korrelators ist, kurzreichweitigen Korrelationen, die nicht durch einen einfachen Versuchszustand dargestellt werden können, durch eine unitäre Transformation desselben zu berücksichtigen. Angenommen die exakte Lösung sei für einen speziellen Fall bekannt, so könnte aus dem Vergleich der exakten Lösung mit dem Versuchszustand die genaue Form der im Versuchszustand fehlenden Korrelationen bestimmt und als unitärer Korrelator formuliert werden. Dieser Vergleich ist im Zweiteilchensystem möglich, da die exakte Lösung der Schrödingergleichung für die Zweiteilchen-Relativwellenfunktion numerisch leicht zu bestimmen ist.

Die Wahl der Ansatzfunktion ist von wesentlicher Bedeutung. Sie entscheidet, welche Art von Korrelationen durch den Korrelator und welche durch den Versuchszustand beschrieben werden sollen. Hier soll der Korrelator nur die kurzreichweitigen Korrelationen berücksichtigen, langreichweitige Korrelationen müssen durch die Freiheitsgrade des Vielteilchen-Versuchszustandes beschrieben werden. Die Isolation der kurzreichweitigen Korrelationen setzt voraus, daß die Ansatzfunktion für große Reichweiten in der Lage ist, die exakte Lösung und die enthaltenen Korrelationen nachzubilden, so daß der Korrelator nur das kurzreichweitige Verhalten aufprägen muß. Die Kurzreichweitigkeit des Korrelators ist unabdingbare Voraussetzung für die Gültigkeit der Zweiteilchennäherung.

Dementsprechend erfolgt die Konstruktion der Zweiteilchen-Ansatzwellenfunktion: Der langreichweitige Teil ( $r > \chi$ ) wird so gewählt, daß er dem asymptotischen Verhalten der exakten Lösung entspricht, der kurzreichweitige Teil ( $r \leq \chi$ ) hat eine Gestalt ähnlich der in der Vielteilchenrechnung verwendeten Versuchswellenfunktion. Im Punkt  $r = \chi$  werden beide stetig differenzierbar verbunden.

Am Beispiel der  $E = 0$ -Streulösung soll das verdeutlicht werden. Die asymptotische Form der exakten Wellenfunktion ist gegeben durch

$$\phi_{\text{ex}}(r) \xrightarrow{r \gg R} \zeta(1 - a/r). \quad (5.25)$$

Dabei ist  $a$  die Streulänge,  $\zeta$  die asymptotische Steigung, die o.B.d.A. auf Betrag 1 normiert wird, und  $R$  die Reichweite des Potentials. Diese asymptotische Lösung soll den langreichweitigen Teil der Ansatzwellenfunktion bilden, der kurzreichweitige Teil wird durch eine Gaußfunktion, wie sie im Vielteilchenversuchszustand verwendet wird, dargestellt. Zusammensetzen der beiden Funktionen im Punkt  $\chi$  unter der Nebenbedingung der stetigen Differenzierbarkeit liefert den sog. Hybridansatz:

$$\phi_0(r) = \begin{cases} \frac{\zeta}{\chi}(\chi - a) \exp\left(-\frac{a}{2(\chi - a)}\right) \exp\left(\frac{a}{2\chi^2(\chi - a)}r^2\right) & ; r \leq \chi \\ \zeta(1 - a/r) & ; r > \chi \end{cases}. \quad (5.26)$$

Die Parameter  $a$  und  $\zeta$  sind durch die exakte Lösung gegeben, der Parameter  $\chi$  bleibt zunächst frei. Für die exakte  $E = 0$ -Lösung des Lennard-Jones-Potentials ergibt sich

$$a = -171.3 \text{ \AA}, \quad \zeta = 1. \quad (5.27)$$

Die große negative Streulänge zeigt, daß das Lennard-Jones-Potential keinen gebundenen Zweiteilchenzustand besitzt, aber dennoch anziehend ist. Eine der Schwächen

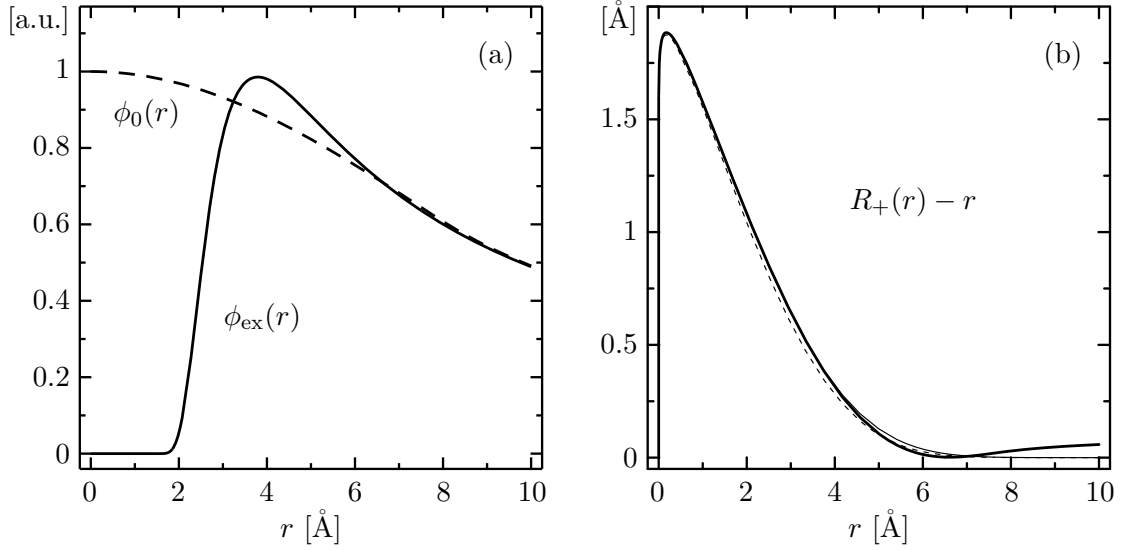


Abbildung 5.2 · (a) Exakte  $E = 0$ -Radialwellenfunktion des Zweiteilchensystems für das Lennard-Jones-Potential (—) und zugehöriger Hybridansatz für  $\chi = 7.83 \text{ \AA}$  (---). (b) Exakter zweiteilchenoptimaler Korrelator (—) und dessen Parametrisierung (---). Zum Vergleich ist der durch Energieminimierung bestimmte Korrelator mit den Parametern (5.24) ebenfalls dargestellt (-----).

des Lennard-Jones-Potential ist, daß es das experimentell nachgewiesene  $^4\text{He}$ -Dimer nicht beschreibt. Moderne Formulierungen der He-He-Wechselwirkung, z.B. das Aziz-Potential [AzNa79], beheben diese Schwäche. Da es an dieser Stelle jedoch in erster Linie um ein Studium der Methode geht, wird das Lennard-Jones-Potential seiner einfachen Darstellung wegen bevorzugt.

Die Abbildung 5.2(a) zeigt die exakte Lösung und den Hybridansatz ( $\chi = 7.83 \text{ \AA}$ ), man erkennt, daß beide im Bereich  $r > 7 \text{ \AA}$  gut übereinstimmen. Bei kleinen Radien zeigt die exakte Lösung aber kurzreichweitige Korrelationen, die im Hybridansatz nicht enthalten sind und die durch den Korrelator beschrieben werden sollen.

Mit Hilfe der exakten Lösung und des Hybridansatzes wird der exakte Korrelator als Abbildung des Hybridansatzes auf die exakte Lösung definiert:

$$\langle r | \mathbf{c}_{\text{ex}} | \phi_0 \rangle \stackrel{!}{=} \langle r | \phi_{\text{ex}} \rangle \quad \text{für } r < \lambda. \quad (5.28)$$

Die Übertragung dieser Definition in die Ortsdarstellung liefert eine implizite Integralgleichung für die Korrelationsfunktion  $R_-(r)$ :

$$[R_-^{\text{ex}}(r)]^3 = 3 \int_0^r \left[ \frac{\phi_{\text{ex}}(\xi)}{\phi_0(R_-^{\text{ex}}(\xi))} \right]^2 \xi^2 d\xi \quad \text{für } r < \lambda. \quad (5.29)$$

Diese Integralgleichung läßt sich numerisch leicht mittels eines Iterationsverfahrens lösen. Zum Zwecke der einfacheren Anwendbarkeit wird das numerische Resultat für die späteren Rechnungen durch eine Parametrisierung für die Korrelationsfunktion  $R_+(r)$  dargestellt. Hier erweist sich einmal mehr die bereits oben verwendete Parametrisierung (5.23) als am besten geeignet. In Teil (b) der Abbildung 5.2 sind die numerisch invertierte Lösung der Integralgleichung und die gefittete Parametrisierung mit den Parametern

$$\alpha = 6.262 \text{ \AA}, \quad \beta = 3.666 \text{ \AA}, \quad \eta = 0.050 \quad (5.30)$$



gegenübergestellt. Diese Parameter stimmen ausgezeichnet mit den durch Energieminimierung bestimmten Parametern (5.24) überein, die Korrelationsfunktionen zeigen praktisch keinen Unterschied. Das ist ein indirekter Beweis, daß die Parametrisierung (5.23) der Korrelationsfunktion sehr gut für das untersuchte Problem geeignet ist. Offenbar ist das Konzept der Energieminimierung zur Bestimmung des optimalen Korrelators mit der Idee der Abbildung auf die exakte Lösung kompatibel.

### 5.3.3 Zustandsgleichung in Zwei- und Dreiteilchennäherung

Mit dem optimalen Korrelator (5.24), der durch Energieminimierung in Zweiteilchennäherung bestimmt wurde, läßt sich die Zustandsgleichung (5.9) für das Bosegas in Zweiteilchennäherung explizit angeben. Es sind lediglich die beiden Integrale (5.10) über das korrelierte Potential  $\tilde{v}(r)$  und den lokalen Teil der korrelierten kinetischen Energie  $\tilde{u}(r)$  numerisch zu berechnen. Für die Proportionalitätskonstanten  $C_v^{[2]}$  und  $C_u^{[2]}$  der Zustandsgleichung ergeben sich die Werte

$$C_v^{[2]} = -856.5 \text{ KÅ}^3, \quad C_u^{[2]} = 401.5 \text{ KÅ}^3. \quad (5.31)$$

Hier zeigt sich eindrucksvoll der Effekt der unitären Korrelatoren. Der unkorrelierte Energieerwartungswert ist durch den unkorrelierten Erwartungswert des Potentials gegeben und geht wegen der kurzreichweitigen  $r^{-12}$  Abstoßung des Lennard-Jones-Potentials gegen  $+\infty$ . Der verwendete Ansatzzustand ist der Wechselwirkung absolut nicht angemessen. Das Einsetzen des Korrelators ändert dies schlagartig. Das Integral über das korrelierte Lennard-Jones-Potential ist negativ und endlich und das zusätzliche kinetische Potential liefert einen positiven Beitrag von etwa halber Größe. Der unitäre Korrelator transformiert die Wellenfunktion bzw. den Hamiltonoperator also derart, daß die korrelierte Wellenfunktion und das ursprüngliche Potential bzw. das korrelierte Potential und die Ansatzwellenfunktion optimal aufeinander abgestimmt sind. Eine ausführliche Diskussion der Eigenschaften des korrelierten Hamiltonoperators findet sich in Abschnitt 6.1.3.

Bereits bei der Diskussion der analytischen Ausdrücke wurde festgestellt, daß die Zweiteilchennäherung prinzipiell kein Minimum der Energie bei endlicher Dichte erzeugen kann — die Energie nimmt proportional der Dichte ab. Die Abbildung 5.3(a) zeigt die Energie, sowie die beiden Einzelbeiträge als Funktion der Dichte. Im Vergleich zum Ergebnis einer als exakt anzusehenden Green's-Function-Monte-Carlo-Rechnung von M.H. Kalos et al. [KaLe81] liegt die Energie im Bereich der erwarteten Sättigung um ca. 50% tiefer.

Um die Sättigungseigenschaften der Zustandsgleichung beschreiben zu können, ist wenigstens die Hinzunahme der Dreiteilchenbeiträge der Clusterentwicklung nötig. Diese trägt mit einem  $\rho^2$ -proportionalen Term bei, so daß, geeignete Proportionalitätskonstanten vorausgesetzt, die Ausbildung eines Energieminimums bei endlicher Dichte möglich wird. Die Berechnung der Proportionalitätskonstanten nach (5.14) erfordert eine sechsdimensionale numerische Integration, die mit dem bereits beim Fermigas verwendeten Monte-Carlo-Algorithmus „VEGAS“ [PrTe92] ausgeführt wird. Die Radialabhängigkeiten der Dreiteilchenbeiträge des korrelierten Potentials wurde mit der verallgemeinerten Koordinatentransformation bestimmt, siehe hierzu Abschnitt 1.4. Es ergibt sich

$$C_v^{[3]} = (-2512 \pm 50) \text{ KÅ}^6, \quad C_u^{[3]} = (29739 \pm 1100) \text{ KÅ}^6. \quad (5.32)$$

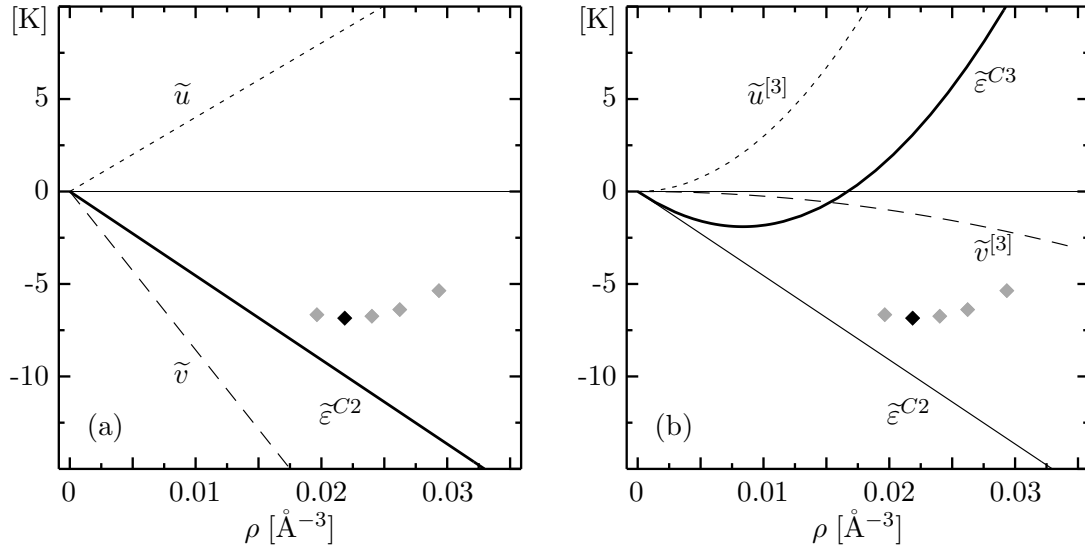


Abbildung 5.3 · Zustandsgleichung für flüssiges  $^4\text{He}$  mit dem Lennard-Jones-Potential in Zwei- und Dreiteilchennäherung. (a) Erwartungswert des korrelierten Potentials  $\tilde{v}$  (---), des kinetischen Potentials  $\tilde{u}$  (-----) und der korrelierten Energie  $\tilde{\epsilon}^{C2}$  (—) in Zweiteilchennäherung. (b) Dreiteilchenbeitrag des korrelierten Potentials  $\tilde{v}^{[3]}$  (---), des kinetischen Potentials  $\tilde{u}^{[3]}$  (-----) und die Energie in Zwei- (—) und Dreiteilchennäherung (—). Der Kleinheitsparameter  $\kappa = \rho V_C$  für den verwendeten Korrelator überschreitet den Wert 0.3 bei einer Dichte von  $\rho \approx 0.007 \text{\AA}^{-3}$ . Die Symbole geben Resultate einer GFMC-Rechnung an [KaLe81].

Der Dreiteilchenbeitrag zum Potential bringt eine kleine zusätzliche Anziehung, die jedoch von der um eine Größenordnung größeren Abstoßung des kinetischen Potentials überlagert wird. Die Abbildung 5.3(b) zeigt die Dreiteilchenbeiträge der Potentiale sowie die Gesamtenergie in Dreiteilchennäherung. Letztere zeigt die in Zweiteilchennäherung fehlende Sättigung, allerdings bei knapp der halben erwarteten Dichte und etwa einem Drittel der Energie.

Die unzureichende Übereinstimmung der Zustandsgleichung in Dreiteilchennäherung mit den exakten Resultaten hat im wesentlichen zwei Ursachen. Wie schon bei der Diskussion des optimalen Korrelators angemerkt, ist der durch Energieminimierung in Zweiteilchennäherung bestimmte optimale Korrelator nicht notwendig optimal für eine Zustandsgleichung in Dreiteilchennäherung. Dies mag in guter Näherung erfüllt sein, solange die Dreiteilchenbeiträge klein gegenüber der Zweiteilchennäherung sind, davon kann hier aber keine Rede sein. Die Dreiteilchenordnung ist für dieses System wesentlich und daher wäre es für eine konsistente Betrachtung der Energie in Dreiteilchennäherung nötig, den optimalen Korrelator durch Energieminimierung in Dreiteilchennäherung zu bestimmen.

Als weitere Ursache für die mangelhafte Übereinstimmung der Dreiteilchennäherung kommt die Vernachlässigung genuiner Dreiteilchenkorrelationen in Frage. Der Korrelationsoperator in der verwendeten Formulierung beschreibt nur genuine Zweiteilchenkorrelationen, d.h. die induzierte Transformation betrifft immer nur Teilchenpaare. Bei Systemen, die so stark von Korrelationen dominiert sind wie flüssiges Helium, reicht dies unter Umständen nicht aus, sondern es müssen genuine Dreiteilchenkorrelationen berücksichtigt werden.

### 5.3.4 Zustandsgleichung mit dichteabhängigem Korrelator

Vor diesem Hintergrund wird einmal mehr die Nützlichkeit und Notwendigkeit einer effektiven Beschreibung der Korrelationen höherer Ordnung klar. Selbst wenn die Dreiteilchenordnung der Clusterentwicklung berechnet werden kann, bleiben doch andere Effekte der höheren Ordnungen, z.B. die genuinen Dreiteilchenkorrelationen, wegen ihrer Komplexität unberücksichtigt. Hier kann eine effektive Beschreibung helfen, die diese Effekte implizit enthält.

Bereits in Abschnitt 5.2.3 wurden zwei mögliche effektive Formulierungen der Korrelationen höherer Ordnungen beschrieben: Die Dreiteilchen-Kontaktwechselwirkung und dichteabhängige Korrelatoren. Beide Ansätze enthalten einen freien Parameter, der die Stärke der Korrektur beschreibt und der durch Anpassung an Daten oder vorhandene Ergebnisse bestimmt werden muß. Da die Hinzunahme der Dreiteilchenordnung nur bis zu Dichten von etwa einem Viertel der Sättigungsdichte eine kleine Korrektur ist, wird die Anpassung an den Sättigungspunkt

$$\rho_{\text{ex}}^{\text{sat}} = 0.0219 \text{ \AA}^{-3}, \quad \epsilon_{\text{ex}}^{\text{sat}} = -6.848 \text{ K} \quad (5.33)$$

der bereits zitierten GFMC-Rechnung [KaLe81] vorgenommen.

Zunächst kurz zur Dreiteilchen-Kontaktwechselwirkung (5.16). Die Anpassung des Stärkeparameters  $\Gamma$  derart, daß die Energie bei Sättigungsdichte der Referenzenergie entspricht, liefert einen Wert  $\Gamma = 6550 \text{ K \AA}^6$ . Die Abbildung 5.4(b) zeigt die resultierende Zustandsgleichung (5.17). Die Kurve verläuft zwar durch den Referenzpunkt, das Minimum liegt jedoch bei weit höherer Dichte und niedrigerer Energie. Der Versuch das Minimum der Zustandsgleichung mit der erwarteten Sättigungsdichte in Einklang zu bringen, führt auf einen größeren Wert von  $\Gamma = 10500 \text{ K \AA}^6$  für den Stärkeparameter und damit auf eine zu geringe Bindungsenergie.

Diese Resultate zeigen unmittelbar, daß es nicht möglich, ist allein durch Hinzufügen eines  $\rho^2$ -Terms zur Zweiteilchennäherung ein realistisches Sättigungsverhalten nachzubilden. Da die Dreiteilchenordnung nur einen  $\rho^2$ -Term erzeugt, ist selbst bei geeignetem Korrelator, d.h. geeigneter Proportionalitätskonstante, keine befriedigende Beschreibung möglich. Offenbar sind auch höhere Potenzen in der Dichte notwendig, um die erwartete Dichteabhängigkeit zu erzeugen. Diese können aber nur von Beiträgen jenseits der Dreiteilchenordnung stammen, die jedoch auch jenseits der derzeitigen numerischen Grenzen liegen.

Der letzte verbleibende Ausweg sind die dichteabhängigen Korrelatoren. Wie in Abschnitt 5.2.3 dargestellt wurde, liefert die Verwendung eines dichteabhängigen Korrelators mit der Skalierungsfunktion (5.19) eine Zustandsgleichung, die alle Potenzen der Dichte enthält. Der dichteabhängige Korrelator ist damit möglicherweise in der Lage, die Mängel der Dreiteilchennäherung und der Dreiteilchen-Kontaktwechselwirkung zu überwinden. Auf Basis der Korrelatorparameter (5.24) wird der freie Parameter  $\gamma$  der Dichteabhängigkeit durch Anpassung an die Energie am Sättigungspunkt bestimmt

$$\gamma = 3.696 \text{ \AA}^3. \quad (5.34)$$

Die Abbildung 5.4(a) zeigt die resultierende Zustandsgleichung — das Ergebnis ist überzeugend. Mit dem dichteabhängigen Korrelator mit lediglich einem freien Parameter ergeben sich sofort die richtige Dichte und Energie für den Sättigungspunkt, obwohl diese Information nicht in den Fit eingegangen ist. Selbst die Form der Zustandsgleichung um das Minimum herum, d.h. die Kompressibilität, stimmt gut mit den Referenzdaten überein.

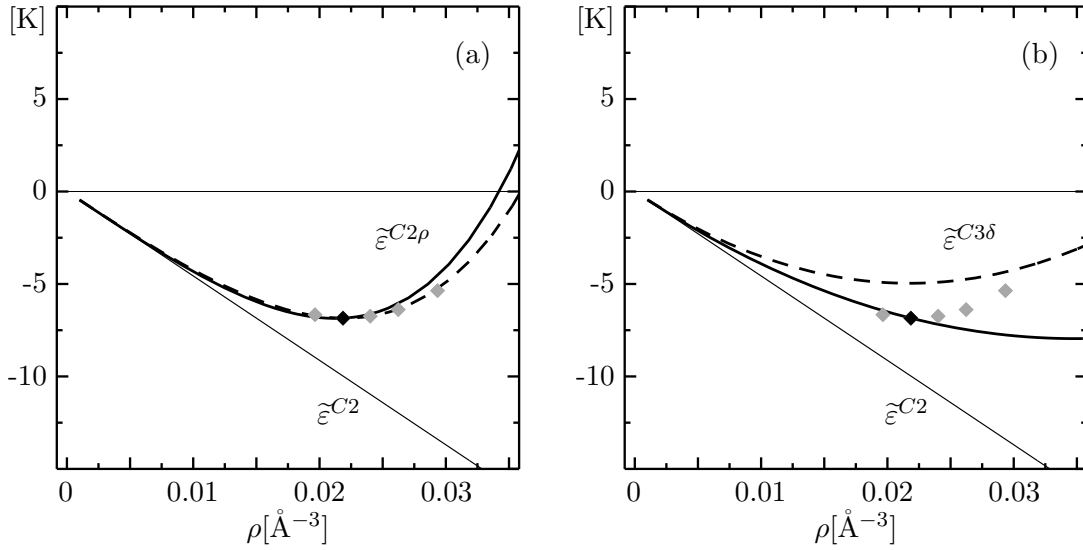


Abbildung 5.4 · Zustandsgleichung für flüssiges  $^4\text{He}$  in Zweiteilchennäherung mit dichteabhängigem Korrelator bzw. einer Dreiteilchen-Kontaktwechselwirkung. (a) Dargestellt ist die Energie in Zweiteilchennäherung unter Verwendung des dichteabhängigen Korrelators mit den Parametern (5.34) (—) bzw. (5.36) (---). (b) Energie unter Hinzunahme einer Dreiteilchen-Kontaktwechselwirkung mit Stärke  $\Gamma = 6550 \text{ K \AA}^6$  (—) bzw.  $\Gamma = 10500 \text{ K \AA}^6$  (---). Zum Vergleich sind die unmodifizierte Energie in Zweiteilchennäherung  $\tilde{\varepsilon}^{C^2}$  (—) und Resultate einer GFMC-Rechnung [KaLe81] angegeben.

Es handelt sich bei den dichteabhängigen Korrelatoren um weit mehr als einen Fit von Vergleichsdaten. Mit einem einzigen freien Parameter ist es möglich, den gesamten funktionalen Verlauf und damit Größen wie Sättigungsdichte, Energie und Kompressibilität sehr gut zu beschreiben — der Ansatz der dichteabhängigen Korrelatoren enthält die relevante Physik. Daß das nicht selbstverständlich ist, zeigt sich durch den Vergleich mit dem Verhalten der Dreiteilchen-Kontaktwechselwirkung. Wesentliches Element der dichteabhängigen Korrelatoren ist, daß sie nicht nur die Dreiteilchenordnung, sondern auch alle höheren Ordnungen der Clusterentwicklung simulieren — das ist für die  $^4\text{He}$ -Flüssigkeit wegen der hohen Dichte unabdingbar. Selbst wenn eine exakte Berechnung der Drei- und Vierteilchenordnung und der entsprechenden optimalen Korrelatoren möglich wäre, so ist zu erwarten, daß auch sie keine befriedigende Beschreibung von der Qualität der hier gezeigten Resultate liefern würde. Die dichteabhängigen Korrelatoren sind also das Mittel der Wahl, wenn Beiträge jenseits der Zweiteilchennäherung relevant werden.

Man kann die Übereinstimmung bezüglich der funktionalen Form sogar noch etwas verbessern, indem man eine minimal modifizierte Skalierungsfunktion

$$\bar{\xi}(\rho) = \lambda - \gamma \rho \quad (5.35)$$

verwendet. Mit den Parametern

$$\lambda = 0.99, \quad \gamma = 3.24 \text{ \AA}^3 \quad (5.36)$$

ergibt sich die in Abbildung 5.4 gestrichelt dargestellte Kurven, die den funktionalen Verlauf der Referenzdaten perfekt nachbildet.

## Kapitel 6

---

# Endliche Systeme: $^4\text{He}$ -Tröpfchen

Zum Abschluß der Untersuchungen im Rahmen der Methode der unitären Korrelatoren werden in diesem Kapitel die Eigenschaften von Systemen kleiner Teilchenzahl studiert. Im Anschluß an die Diskussion der homogenen  $^4\text{He}$ -Flüssigkeit werden die Eigenschaften kleiner  $^4\text{He}$ -Tröpfchen betrachtet. Der Sprung von einem Ende der Teilchenzahlskala zum anderen zeigt, wie universell das Werkzeug unitärer Korrelator einsetzbar ist. Darüber hinaus wird deutlich, daß der Korrelationsoperator die generischen Eigenschaften der kurzreichweitigen wechselwirkungsinduzierten Korrelationen systemunabhängig beschreibt.

## 6.1 Ein einfaches Variationsmodell

### 6.1.1 Versuchszustand

Wie bereits bei der Konstruktion des Versuchszustandes für die Beschreibung der  $^4\text{He}$ -Flüssigkeit macht man sich die Eigenschaft des  $T = 0\text{ K}$  Grundzustandes, daß alle Atome im gleichen Einteilchenzustand vorliegen, zunutze. Der Zustand des  $N$ -Teilchensystems ist das direkte Produkt von  $N$  identischen Einteilchenzuständen

$$|\Psi, N\rangle := \underbrace{|\psi\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi\rangle}_{N \text{ Einteilchenzustände}}. \quad (6.1)$$

Die Symmetrie gegenüber Teilchenvertauschung ist automatisch gewährleistet. Der Einteilchenzustand  $|\psi\rangle$  soll durch eine hinreichend flexible Parametrisierung mit möglichst wenigen Parametern dargestellt werden. Hier bietet sich eine Gaußfunktion mit variabler Breite  $a$  an

$$\langle \vec{x} | \psi \rangle = (\pi a)^{-3/4} \exp\left(-\frac{\vec{x}^2}{2a}\right). \quad (6.2)$$

Diese Parametrisierung hat sich allgemein bei der Untersuchung selbstgebundener Systeme bewährt. Im Zusammenspiel mit den unitären Korrelatoren wurde sie bereits erfolgreich zur Beschreibung kleiner Kerne eingesetzt [Roth97, UCOM98]. Außerdem erlaubt sie die exakte Separation der Schwerpunktskoordinate.

Der Vielteilchenversuchszustand  $|\Psi, N\rangle$  besitzt als einzigen Variationsparameter die Breite  $a$  der Einteilchenwellenpakete. Für die Berechnung der Erwartungswerte in Zweiteilchennäherung ist es hilfreich, die Wellenfunktion im Zweiteilchenraum in Relativanteil  $|\phi\rangle$  und Schwerpunktsanteil  $|\Phi\rangle$  zu separieren

$$\langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | \Psi, 2 \rangle = \langle \vec{X} | \Phi \rangle \langle \vec{r} | \phi \rangle. \quad (6.3)$$

Für die Ortsdarstellung der beiden Komponenten gilt:

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | \phi \rangle &= (2\pi a)^{-3/4} \exp\left(-\frac{\vec{r}^2}{4a}\right), \\ \langle \vec{X} | \Phi \rangle &= (\pi a/2)^{-3/4} \exp\left(-\frac{\vec{X}^2}{a}\right). \end{aligned} \quad (6.4)$$

Wie bereits angedeutet, erlaubt die Struktur des Vielteilchenzustandes eine sehr einfache Berechnung der Erwartungswerte von irreduziblen  $k$ -Teilchenoperatoren  $\mathbf{O}^{[k]}$ . Es gilt:

$$\langle \Psi, N | \mathbf{O}^{[k]} | \Psi, N \rangle = \frac{N!}{k! (N-k)!} \langle \Psi, k | \mathbf{O}^{[k]} | \Psi, k \rangle. \quad (6.5)$$

Es ist also nur der Erwartungswert des  $k$ -Teilchenoperators im  $k$ -Teilchenraum zu berechnen und mit dem kombinatorischen Faktor auf den  $N$ -Teilchenraum zu skalieren.

Im Zusammenhang mit dieser technischen Vereinfachung treten an anderer Stelle neue Probleme auf. Nach wie vor sollen die korrelierten Operatoren in niedriger Ordnung der Clusterentwicklung behandelt werden, d.h. der korrelierte Operator wird in seine irreduziblen Beträge bis zur Teilchenzahl  $N$  zerlegt und nur die niedrigsten Ordnungen werden berücksichtigt. Diese Näherung ist nur dann sinnvoll, wenn die Beiträge der höheren Ordnungen hinreichend klein sind. Durch den kombinatorischen Faktor werden die höheren Ordnungen jedoch deutlich stärker gewichtet als die niedrigen Ordnungen. Dieser Effekt tritt insbesondere dann auf, wenn alle Teilchen im gleichen Einteilchenzustand sind, dessen Ausdehnung nicht viel größer als die Reichweite von  $\mathbf{O}^{[k]}$  ist. Es ist zu erwarten, daß die Näherung einer abgebrochenen Clusterentwicklung weniger gut geeignet ist als in entsprechenden fermionischen Systemen.

### 6.1.2 Optimaler Korrelator

Zuerst stellt sich die Frage nach dem optimalen Korrelator für das betrachtete System. Wenn davon ausgegangen wird, daß die Zweiteilchennäherung ausreichend ist, dann ist der optimale Korrelator durch Eigenschaften des Zweiteilchensystems definiert. Da das Lennard-Jones-Potential keinen gebundenen Zweiteilchenzustand besitzt, kann die Korrelatoroptimierung entweder anhand der  $E = 0$ -Streulösung oder durch Energieminimierung mit konstanter Zweiteilchen-Relativwellenfunktion erfolgen. Diese Verfahren wurden bereits bei der Diskussion der  $^4\text{He}$ -Flüssigkeit in den Abschnitten 5.3.2 bzw. 5.3.1 angewendet. Es wurde gezeigt, daß die resultierenden optimalen Korrelatoren sehr gut übereinstimmen. Hier wird der durch Energieminimierung im Zweiteilchensystem bestimmte Korrelator (5.24) aufgegriffen.

Nach den Ergebnissen für die  $^4\text{He}$ -Flüssigkeit zu urteilen, wird die Zweiteilchennäherung für die Beschreibung der  $^4\text{He}$ -Tröpfchen nur sinnvoll sein, wenn deren Dichte viel kleiner als die Sättigungsdichte der homogenen Flüssigkeit ist. Nur in diesem Fall

liegt der Kleinheitsparameter  $\kappa = \rho V_C$  unterhalb der empirischen Schranke von 0.3 für die uneingeschränkte Anwendbarkeit der Zweiteilchennäherung. Daher ist auch der im Zweiteilchensystem optimierte Korrelator nur bedingt tauglich. Wie bereits diskutiert wäre es für eine konsistente Beschreibung nötig, den Korrelator durch Energieminimierung in derselben Ordnung der Clusterentwicklung zu bestimmen, die auch in der späteren Strukturrechnung Verwendung findet — d.h. wenn eine Rechnung in Dreiteilchennäherung nötig ist, dann sollte auch der Korrelator bezüglich der Dreiteilchennäherung optimiert sein.

### 6.1.3 Korrelierter Hamiltonoperator in Zweiteilchennäherung

Mit Hilfe der gegebenen Parametrisierung der Korrelationsfunktion läßt sich der korrelierte Hamiltonoperator wie in den vorangehenden Untersuchungen explizit angeben

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{H}}^{C2} &= \mathbf{T}_{\text{int}} + \tilde{\mathbf{V}} + \tilde{\mathbf{U}} + \tilde{\mathbf{T}}_{\Omega} + \tilde{\mathbf{T}}_{r*} \\ &= \mathbf{T}_{\text{int}} + \sum_{i<j} \tilde{\mathbf{v}}(ij) + \sum_{i<j} \tilde{\mathbf{u}}(ij) + \sum_{i<j} \tilde{\mathbf{t}}_{\Omega}(ij) + \sum_{i<j} \tilde{\mathbf{t}}_{r*}(ij).\end{aligned}\quad (6.6)$$

Im Gegensatz zu den homogenen Systemen ist im endlichen System die kinetische Energie der Schwerpunktsbewegung  $\mathbf{T}_{\text{cm}}$  zu berücksichtigen. Da die Bindungsenergien der Tröpfchen berechnet werden sollen, ist dieser Schwerpunktsanteil von der vollen kinetischen Energie zu subtrahieren. Das führt auf die sog. intrinsische kinetische Energie  $\mathbf{T}_{\text{int}}$ . Dieser Operator kann in folgende nützliche Form gebracht werden [Roth97]:

$$\begin{aligned}\mathbf{T}_{\text{int}} &= \mathbf{T} - \mathbf{T}_{\text{cm}} = \sum_i \frac{1}{2m} \vec{\mathbf{p}}(i)^2 - \frac{1}{2Nm} \left[ \sum_i \vec{\mathbf{p}}(i) \right]^2 \\ &= \frac{2}{N} \sum_{i<j} \frac{1}{2\mu} \vec{\mathbf{q}}(ij)^2 = \frac{2}{N} \sum_{i<j} \mathbf{t}_{\text{rel}}(ij),\end{aligned}\quad (6.7)$$

wobei  $\vec{\mathbf{q}}(ij) := \vec{\mathbf{p}}(i) - \vec{\mathbf{p}}(j)$  den Relativimpuls zweier Teilchen bezeichnet. Darüber hinaus werden die effektiven Massenkorrekturen in der Zerlegung in Radialanteil  $\tilde{\mathbf{t}}_{r*}$  und Winkelanteil  $\tilde{\mathbf{t}}_{\Omega}$  entsprechend Gleichung (1.42) dargestellt. Aufgrund der Rotations-symmetrie der Relativwellenfunktion in diesem speziellen System trägt der Winkelanteil nicht bei, so daß nur der Radialteil ausgewertet werden muß.

Durch Einsetzen des Lennard-Jones-Potentials und des optimalen Korrelators (5.24) lassen sich die Radialabhängigkeiten des korrelierten Potentials  $\tilde{v}(r)$ , des lokalen Teils der korrelierten kinetischen Energie  $\tilde{u}(r)$  und der effektiven Massenkorrekturen für Radial- bzw. Winkelanteil,  $\mu/\tilde{\mu}_{r*}(r)$  bzw.  $\mu/\tilde{\mu}(r)$ , entsprechend Abschnitt 1.3.3 explizit angeben.

Die Abbildung 6.1 zeigt die lokalen Terme des korrelierten Hamiltonoperators. Teil (a) macht deutlich, daß die Stärke des Cores für das korrelierte Potential gegenüber dem unkorrelierten Lennard-Jones-Potential drastisch reduziert ist, es verbleibt lediglich eine minimale Abstoßung bei kurzen Reichweiten. Das Integral über das mit  $r^2$  gewichtete korrelierte Potential nimmt einen endlichen negativen Wert an, während es für das Ausgangspotential noch positiv divergent war. Der erste deutliche Effekt des Korrelators ist also die Regularisierung des Potentials.

In Abbildung 6.1(b) ist das korrelierte Potential und der Potentialteil der korrelierten kinetischen Energie sowie die Summe der beiden dargestellt. Bei kurzen Radien

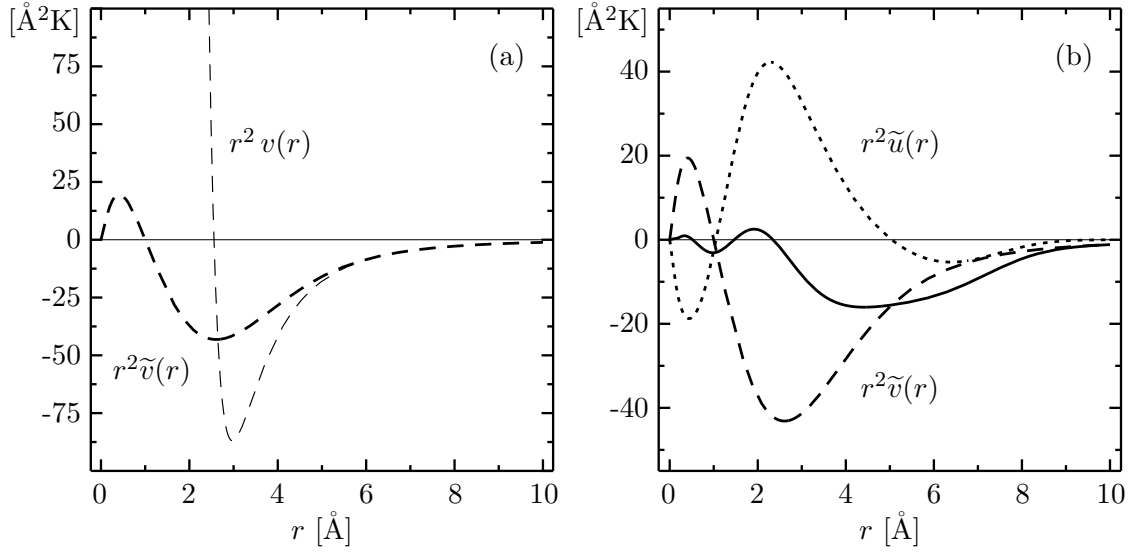


Abbildung 6.1 · Mit  $r^2$  gewichtete Radialabhängigkeiten der lokalen Terme des korrelierten Hamiltonoperators für das Lennard-Jones-Potential. (a) unkorreliertes Lennard-Jones-Potential  $r^2 v(r)$  (---) und korreliertes Potential  $r^2 \tilde{v}(r)$  (-·-·-). (b) Korreliertes Potential  $r^2 \tilde{v}(r)$  (-·-·-), Potentialteil der korrelierten kinetischen Energie  $r^2 \tilde{u}(r)$  (.....) und Summe beider lokalen Terme (—).

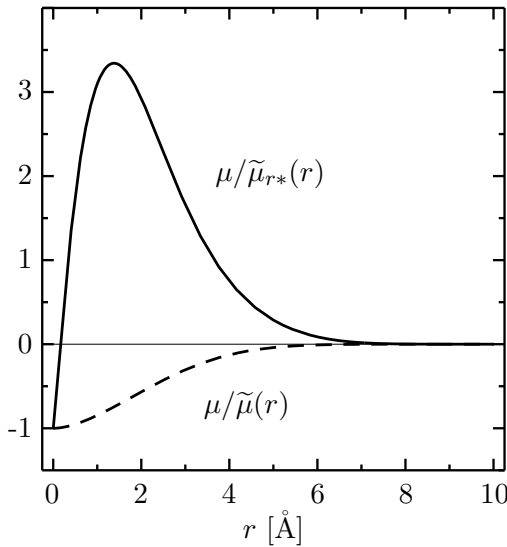


Abbildung 6.2 · Radialabhängigkeit der effektiven Massenkorrekturen des korrelierten Hamiltonoperators. Radialteil der effektiven Massenkorrektur  $\mu/\tilde{\mu}_r(r)$  (—) und Winkelanteil  $\mu/\tilde{\mu}_\Omega(r)$  (---) für den optimalen Korrelator des Lennard-Jones-Potential.

entspricht der Beitrag der kinetischen Energie ungefähr dem negativen korrelierten, so daß die Summe der beiden lokalen Terme des korrelierten Hamiltonoperators bis zu  $r \approx 2.5\text{Å}$  praktisch verschwindet. Das ist gerade der Bereich, in dem der abstoßende Core der ursprünglichen Wechselwirkung liegt. Die Summe aller potentialartigen Terme des korrelierten Hamiltonoperators zeigt also *keinerlei Abstoßung* mehr! Dafür ist der mittelreichweitige anziehende Teil des Potentials durch den kinetischen Beitrag deutlich reduziert. Betrachtet man die Integrale über die mit  $r^2$  gewichteten Radialabhängigkeiten, so liefert der kinetische Term einen positiven Beitrag von etwa der halben Größe des negativen Beitrags des korrelierten Potentials. Die Summe der beiden Terme ist also negativ, besitzt jedoch aufgrund des positiven Beitrag des kinetischen Potentials



nur die halbe Stärke des korrelierten Potentials.

Die Abbildung 6.2 zeigt die effektiven Massenkorekturen für die Radial- und die Winkelkomponente. Die allgemeine Form der Radialabhängigkeiten läßt sich mit dem komplementären Bild der korrelierten Wellenfunktion verstehen: Der Korrelator unterdrückt die Wellenfunktion bei kleinen Abständen und erzeugt somit zusätzliche Krümmung im Vergleich zur unkorrelierten Wellenfunktion. Wirkt der (unkorrelierte) Operator der kinetischen Energie auf die korrelierte Wellenfunktion, so liefert der Radialanteil im Bereich des Korrelationslochs einen erhöhten Beitrag durch die zusätzliche Krümmung. Dagegen wird der Winkelanteil im Bereich des Korrelationslochs reduziert, da die korrelierte Wellenfunktion weniger Stärke innerhalb der Zentrifugalbarriere besitzt. In der Darstellung als korrelierte Wechselwirkungen zeigen sich diese Effekte direkt in den Massenkorekturen. Der Radialanteil der korrelierten kinetischen Energie wird innerhalb der Reichweite der Korrelationen verstärkt, der Winkelanteil hingegen reduziert.

Alles zusammengekommen setzt sich der korrelierte Hamiltonoperator aus der unkorrelierten kinetischen Energie mit abstandsabhängigen Massenkorekturen für Radial- und Winkelkomponenten und einem lokalen Potential zusammen. Der Potentialteil verschwindet für kurze Abstände und besitzt auf mittleren Reichweiten eine gegenüber dem Ausgangspotential reduzierte Anziehung. Der Radialteil der Massenkorrektur liefert dagegen eine impulsabhängige Abstoßung, die durch den Winkelanteil zum Teil wieder kompensiert wird. Durch Anwendung des Korrelators wird ein Teil der Abstoßung des ursprünglichen Potentials also vom Ortsraum auf den Impulsraum verlagert. Das geschieht so, daß die korrelierte Wechselwirkung glatten Versuchszuständen angepaßt ist.

Mit den gegebenen Radialabhängigkeiten kann der Erwartungswert des korrelierten Hamiltonoperators in Zweiteilchennäherung (6.6) numerisch berechnet werden. Die im folgenden betrachtete Energie pro Teilchen  $\tilde{\varepsilon}^{C2}$  ist definiert durch

$$\tilde{\varepsilon}^{C2} = \frac{1}{N} \langle \Psi, N | \tilde{\mathbf{H}}^{C2} | \Psi, N \rangle. \quad (6.8)$$

Vermöge der einfachen Struktur des Versuchszustandes ist sie nur eine Funktion der Teilchenzahl und des Breiteparameters der Einteilchenwellenfunktion. Die Abhängigkeit von der Teilchenzahl ist im wesentlichen durch die Skalierungseigenschaft (6.5) der Erwartungswerte bestimmt. Entsprechend der Struktur des korrelierten Hamiltonoperators (6.6) ergibt sich für den Energieerwartungswert pro Teilchen

$$\tilde{\varepsilon}^{C2}(N, a) = \frac{N-1}{N} t_{\text{rel}}(a) + \frac{N-1}{2} [\tilde{v}(a) + \tilde{u}(a) + \tilde{t}_{r*}(a)]. \quad (6.9)$$

Dabei wurde bereits berücksichtigt, daß der Winkelanteil der effektiven Massenkorrektur wegen des sphärisch symmetrischen Versuchszustandes nicht beiträgt. Die  $a$ -abhängigen Funktionen sind durch die Erwartungswerte der entsprechenden Terme im Zweiteilchensystem bestimmt. Für den Relativteil der kinetischen Energie gilt

$$t_{\text{rel}}(a) = \frac{1}{2\mu} \int d^3r \left| \frac{\partial}{\partial r} \langle r | \phi \rangle \right|^2 = \frac{1}{2\mu} \frac{3}{4a}, \quad (6.10)$$

dabei wurde von der Gaußform (6.4) der Versuchszustände Gebrauch gemacht. Für das korrelierte Potential gilt

$$\tilde{v}(a) = \int d^3r \tilde{v}(r) |\langle r | \phi \rangle|^2 \quad (6.11)$$

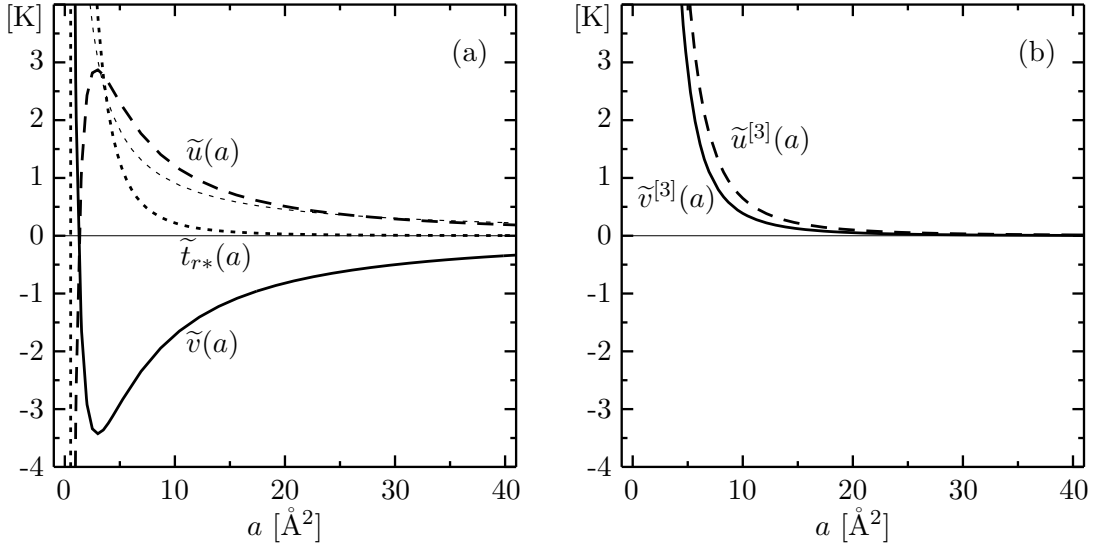


Abbildung 6.3 · Beiträge zum Energieerwartungswert in Abhängigkeit vom Breiteparameter  $a$  der Versuchswellenfunktion. (a) Beiträge in Zweiteilchennäherung: kinetische Energie  $t_{\text{rel}}(a)$  (-----), korreliertes Potential  $\tilde{v}(a)$  (—), Potentialteil der korrelierten kinetischen Energie  $\tilde{u}(a)$  (- - -) und effektive Massenkorrektur  $\tilde{t}_{r*}(a)$  (.....). (b) Dreiteilchenbeiträge zum korrelierten Potential  $\tilde{v}^{[3]}(a)$  (—) und zum Potentialteil der kinetischen Energie  $\tilde{u}^{[3]}(a)$  (- - -).

und entsprechendes für den Potentialteil der korrelierten kinetischen Energie  $\tilde{u}(a)$ . Schließlich ergibt sich für die radiale Massenkorrektur

$$\tilde{t}_{r*}(a) = \frac{1}{2\mu} \int d^3r \frac{\mu}{\tilde{\mu}_{r*}(r)} \left| \frac{\partial}{\partial r} \langle r | \phi \rangle \right|^2. \quad (6.12)$$

Die Integrationen in den letzten beiden Gleichungen sind numerisch durchzuführen, sie lassen sich ohne weitere Schwierigkeiten mit der internen Mathematica-Routine NIntegrate behandeln.

In Abbildung 6.3(a) sind die einzelnen Terme des Energieerwartungswertes in Zweiteilchennäherung für den relevanten Bereich des Breiteparameters  $a$  aufgetragen. Für Breiten im physikalischen Bereich  $a > 10 \text{ \AA}^2$  liefern die unkorrelierte kinetische Energie und der lokale Teil der korrelierten kinetischen Energie einen etwa gleichen positiven Beitrag. Der einzige negative Beitrag, d.h. der Term, der Anziehung liefert, stammt vom korrelierten Potential, der etwa der Summe der beiden abstoßenden Terme entspricht. In der Summe heben sich diese Beiträge im wesentlichen auf. Der Beitrag der effektiven Massenkorrektur spielt für große und mittlere Breiten keine Rolle.

Die hier gezeigten Kurven entsprechen den Erwartungswerten für das Zweiteilchensystem, für andere Teilchenzahlen sind Skalierungsfaktoren entsprechend (6.9) hinzuzufügen. Die hier zu beobachtende Aufhebung der beiden positiven Beiträge mit dem negativen korrelierten Potential, die dazu führt, daß kein gebundener Zweiteilchenzustand existiert, wird in Systemen mit größerer Teilchenzahl nicht auftreten, da die positive unkorrelierte kinetische Energie nicht wie die übrigen Terme linear mit der Teilchenzahl anwächst — für höhere Teilchenzahlen existieren gebundene Zustände.

Für Breiten kleiner als  $10 \text{ \AA}^2$  zeigen sich dramatische Abweichungen von der eher schwachen Dichteabhängigkeit bei großen Breiten. Unterhalb von  $3 \text{ \AA}^2$  steigt der Beitrag des korrelierten Potentials stark an und wird massiv abstoßend, umgekehrt fällt

der Beitrag des kinetischen Potentials ab und wird stark anziehend. In diesem Parameterbereich sind die Einteilchenwellenfunktionen vollständig im Korrelationsvolumen  $V_C$  lokalisiert. Bereits bei der Diskussion der Radialabhängigkeiten (siehe Abbildung 6.1) wurde ersichtlich, daß das korrelierte Potential bei kleinen Reichweiten weiterhin eine abstoßende Komponente besitzt, die von einer entsprechenden anziehenden Komponente des lokalen Teils der korrelierten kinetischen Energie kompensiert wird. Die Abstoßung im Potential bewirkt das Ansteigen des Erwartungswertes für Breiten in der Größenordnung der Reichweite dieser Abstoßung, die Anziehung im kinetischen Potential einen entsprechenden Abfall der Erwartungswerte — beide kompensieren sich fast vollkommen.

Der Energieerwartungswert wird bei kleinen Breiten vom Beitrag der effektiven Masssenkorrektur dominiert, er steigt wesentlich stärker als die unkorrelierte kinetische Energie an und liefert einen großen positiven Beitrag. Bei extrem kleinen Breiten ( $a < 1 \text{ \AA}^2$ ) zeigt auch dieser Term plötzlich eine Trendumkehr und der Beitrag fällt rapide ab und wird sogar massiv negativ. Dieser pathologische Zusammenbruch ist in der konkreten Rechnung nicht von Bedeutung, da die Breiten weit von der physikalisch sinnvollen Größenordnung entfernt sind. Weiterreichende Untersuchungen hierzu finden sich in [Roth97].

#### 6.1.4 Dreiteilchenbeitrag zum korrelierten Hamiltonoperator

Die Untersuchungen zur  $^4\text{He}$ -Flüssigkeit lassen vermuten, daß die Zweiteilchenordnung für eine sinnvolle Beschreibung nicht ausreicht, da die Dichten zu groß sind. Daher sollen auch für die Tröpfchen die wesentlichen Terme der dritten Clusterordnung berücksichtigt werden, nämlich die lokalen Dreiteilchenteile von korreliertem Potential und korrelierter kinetischer Energie. Die Energie pro Teilchen in Dreiteilchennäherung ist gegeben durch

$$\tilde{\varepsilon}^{C3^*}(N, a) = \tilde{\varepsilon}^{C2}(N, a) + \frac{(N-1)(N-2)}{6} [\tilde{v}^{[3]}(a) + \tilde{u}^{[3]}(a)]. \quad (6.13)$$

Das Symbol „ $C3^*$ “ deutet an, daß nicht die volle Dreiteilchenordnung, sondern nur die lokalen Terme berücksichtigt werden.

Zur Beschreibung der Korrelationen in Dreiteilchenordnung wird auf die in Abschnitt 1.4 eingeführte verallgemeinerte Koordinatentransformation zurückgegriffen. Sie liefert den Dreiteilchenbeitrag zum korrelierten Potential  $\tilde{v}^{[3]}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3)$  und den lokalen Teil des Dreiteilchenbeitrags der korrelierten kinetischen Energie  $\tilde{u}^{[3]}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3)$  als Funktionen der drei Koordinaten. Die Erwartungswerte dieser beiden Dreiteilchenpotentiale pro Teilchen als Funktion des Breiteparameters  $a$  sind gegeben durch

$$\tilde{v}^{[3]}(a) = \int d^3x_1 d^3x_2 d^3x_3 \tilde{v}^{[3]}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3) |\langle \vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3 | \Psi, 3 \rangle|^2 \quad (6.14)$$

und entsprechend für den kinetischen Teil  $\tilde{u}^{[3]}(a)$ . Die hier auftretenden neundimensionalen Integrationen lassen sich mit Hilfe von Monte Carlo-Methoden bewältigen, wie in den vorangehenden Fällen wird auf eine Routine aus [PrTe92] zurückgegriffen. Für die angestrebte Minimierung in Dreiteilchennäherung werden die Dreiteilchenintegrale für ca. 15 repräsentative Werte des Breiteparameters  $a$  berechnet und tabelliert. Für jedes Integral werden ca.  $10^7$  Samplingpunkte ausgewertet, so daß der relative statistische Fehler auf unter 1% abgesunken ist. Schließlich werden die berechneten Punkte

durch eine geeignete Parametrisierung in Potenzen von  $1/a$  gefittet, damit steht für die Minimierung eine analytische Funktion bereit.

Die Erwartungswerte der beiden Dreiteilchenpotentiale, d.h. die Funktionen  $\tilde{v}^{[3]}(a)$  und  $\tilde{u}^{[3]}(a)$ , sind in Abbildung 6.3(b) dargestellt. Beide liefern einen positiven Beitrag zum Energieerwartungswert in Dreiteilchennäherung, der mit sinkender Breite der Wellenfunktion dramatisch anwächst. Der Dreiteilchenanteil liefert einen dominanten Beitrag, wenn die Einteilchenwellenfunktionen praktisch vollständig im Korrelationsvolumen  $V_C$  lokalisiert sind, d.h. wenn  $a^{3/2} \lesssim V_C$ , was für den vorliegenden Korrelator bei  $a \lesssim 10\text{\AA}^2$  eintritt. Der Dreiteilchenbeitrag wird aufgrund dieser Breitenabhängigkeit bei einer Energieminimierung immer zu höheren Energien, d.h. schwächerer Bindung, und größeren Radien führen als die Zweiteilchennäherung allein.

## 6.2 $^4\text{He}$ -Tröpfchen mit Lennard-Jones-Potential

### 6.2.1 Energieminimierung in Zweiteilchennäherung

Die nötigen Werkzeuge zur Behandlung des Variationsproblems für kleine  $^4\text{He}$ -Tröpfchen stehen nun zur Verfügung: der Vielteilchenversuchszustand mit dem Variationsparameter  $a$  und der korrelierte Hamiltonoperator in Zweiteilchennäherung mit entsprechendem optimalem Korrelator. Mit den bereits besprochenen Einschränkungen bezüglich der Tauglichkeit wird die Energieminimierung in Zweiteilchennäherung für  $^4\text{He}$ -Tröpfchen mit Teilchenzahlen im Bereich  $3 \leq N \leq 70$  durchgeführt.

Als Referenz für die Cluster mit Teilchenzahlen  $N \leq 10$  steht eine Variationsrechnung auf Basis des Jastrowansatzes zur Verfügung [ScSc65]. Der Vielteilchenversuchszustand wird in dieser Arbeit als Produkt von  $N(N-1)/2$  identischen Zweiteilchen-Jastrowfunktionen beschrieben, die vier Variationsparameter enthalten. Der Energieerwartungswert wird direkt durch hochdimensionale Monte-Carlo-Integration berechnet, so daß keine Clusterentwicklung nötig ist. Da sich diese Jastrowrechnung auch auf Zweiteilchenkorrelationen beschränkt, aber im Gegensatz zur hier dargestellten Rechnung ohne abgebrochene Clusterentwicklung auskommt, erlaubt der Vergleich direkte Rückschlüsse auf die Effekte der Clusternäherung.

Die Abbildungen 6.4 und 6.5 zeigen die resultierenden Bindungsenergien pro Teilchen und die korrelierten schwerpunktsbereinigten rms-Radien in Abhängigkeit von der Teilchenzahl  $N$  im Vergleich zu den Referenzergebnissen. Ergebnisse zu höheren Teilchenzahlen sind mit weiteren Details in Tabelle 6.1 auf Seite 123 zusammengestellt. Die Bindungsenergien zeigen für Teilchenzahlen  $N \leq 6$  eine gute Übereinstimmung mit den Referenzwerten. In Anbetracht der geringen Bindung und der Dominanz der kurzreichweitigen Korrelationen ist das ein überraschend gutes Ergebnis. Für Teilchenzahlen  $N > 6$  zeigt sich eine systematische Überbindung gegenüber den Jastrowrechnungen und damit wohl auch gegenüber den exakten Grundzustandsenergien. Hier ist zu bemerken, daß durch die näherungsweise Berechnung des Energieerwartungswertes die exakte Grundzustandsenergie keine untere Schranke für die Variationsrechnung mehr darstellt. Diese Schrankeneigenschaft ist im Rahmen des Ritzschen Variationsprinzips nur bei exakter Berechnung des Energieerwartungswertes, d.h. im vorliegenden Fall der vollständigen Summation der Clusterentwicklung, gültig. Es ist sehr wohl möglich, daß der in Zweiteilchennäherung berechnete Energieerwartungswert unter dem exakten Resultat liegt, die höheren Ordnungen der Clusterentwicklung müssen dann mindestens die

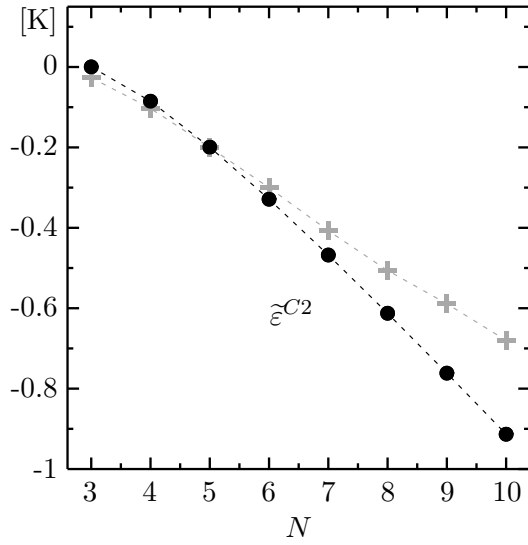


Abbildung 6.4 · Resultat der Energieminimierung in Zweiteilchennäherung. Dargestellt ist die Energie pro Teilchen in Zweiteilchennäherung (●) für die verschiedenen Teilchenzahlen. Zum Vergleich die Energien der Jastrowrechnungen [ScSc65] (⊕).

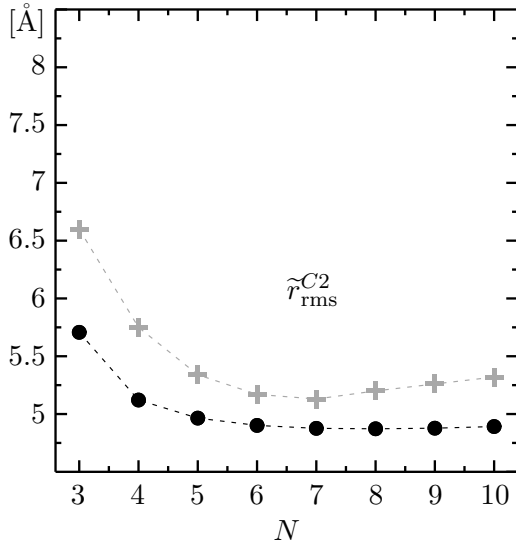


Abbildung 6.5 · rms-Radius der in Zweiteilchennäherung minimierten Zustände (●) im Vergleich zu den Ergebnissen der Jastrowrechnungen [ScSc65] (⊕).

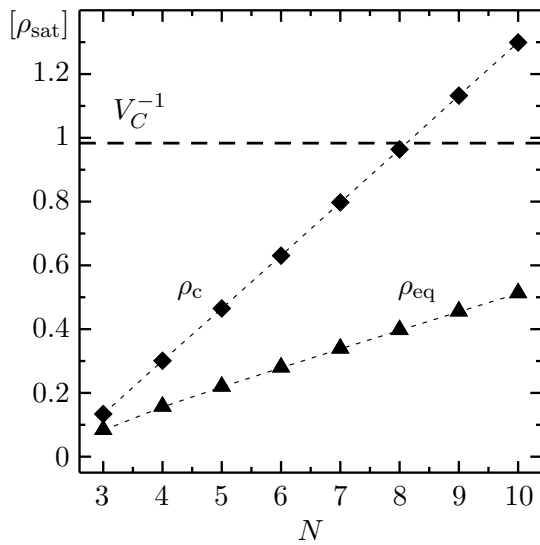


Abbildung 6.6 · Äquivalentdichte (▲) und Zentralsdichte (◆) in Einheiten der Sättigungsdichte der  $^4\text{He}$ -Flüssigkeit für die in Zweiteilchennäherung energieminimalen Zustände, sowie das inverse Korrelationsvolumen (---).

Differenz zur exakten Energie beitragen.

Ein erstes qualitatives Maß für die Gültigkeit der Zweiteilchennäherung und die Rolle der höheren Clusterordnungen ist der sog. Kleinheitsparameter. Er vergleicht die Reichweite der Korrelationen mit dem typischen Abstand zwischen den Teilchen, oder das Volumen des Korrelationslochs mit einer typischen Dichte im Vielteilchensystem. Das Korrelationsvolumen (1.18) beschreibt das Volumen des Lochs, das der Korrelator angewendet auf eine konstante Zweiteilchenwellenfunktion erzeugt. Ein Maß für die globale Dichte in endlichen inhomogenen Systemen läßt sich auf unterschiedliche Weise definieren. Die einfachste, wenn auch nicht beste, Wahl ist die maximale oder zentrale Dichte des Tröpfchens. Für gaußförmige Versuchswellenfunktionen ist diese Dichte nur von der Teilchenzahl und dem Breiteparameter  $a$  abhängig, es gilt

$$\rho_c = \frac{N}{(\pi a)^{3/2}}. \quad (6.15)$$

Ein besseres Maß im Sinne einer mittleren Dichte ist die sog. Äquivalentdichte. Sie ist durch die Dichte der sphärischen Kastenverteilung mit gleicher Teilchenzahl und gleichem rms-Radius gegeben. Für eine gaußförmige Versuchswellenfunktion gilt

$$\rho_{\text{eq}} = \frac{3N}{4\pi} \left[ \frac{3}{5} \frac{1}{r_{\text{rms}}^2} \right]^{3/2} = \frac{3N}{4\pi} \left[ \frac{2}{5} \frac{N}{N-1} \frac{1}{a} \right]^{3/2}. \quad (6.16)$$

Der Vergleich des Korrelationsvolumens mit dieser mittleren Dichte führt direkt auf den Kleinheitsparameter

$$\kappa_{\text{eq}} = \rho_{\text{eq}} V_C. \quad (6.17)$$

Diese Größe läßt sich anschaulich als Wahrscheinlichkeit deuten, ein drittes Teilchen im Korrelationsvolumen zweier wechselwirkender Teilchen zu finden. Um die Gültigkeit der Zweiteilchennäherung zu gewährleisten, muß diese Wahrscheinlichkeit klein gegen 1 sein, da in der Näherung alle Beiträge jenseits der Zweiteilchenordnung vernachlässigt werden.

Für den hier verwendeten Korrelator ergibt sich für das Korrelationsvolumen  $V_C = 46.4 \text{ \AA}^3$ . In Abbildung 6.6 ist der Kehrwert des Korrelationsvolumens, die Äquivalentdichte und die Zentraldichte in Einheiten der Sättigungsdichte der  $^4\text{He}$ -Flüssigkeit (5.33) dargestellt — das Verhältnis von Dichte zu inversem Korrelationsvolumen ergibt gerade den Kleinheitsparameter. Die Dichte der Systeme und damit der Kleinheitsparameter nimmt annähernd linear mit der Teilchenzahl zu, bei  $N = 6$  erreicht die Äquivalentdichte etwa 30% des inversen Korrelationsvolumens, die Zentraldichte bereits 70%. Damit ist klar, daß die Zweiteilchennäherung oberhalb dieser Teilchenzahl keine gültige Approximation mehr darstellt.

Ein weiteres Indiz für das Versagen der Zweiteilchennäherung liefern die rms-Radien in Abbildung 6.5. Sie zeigen zwar eine qualitativ korrekte Teilchenzahlabhängigkeit, sind aber um ca. 10% zu klein. Damit ist die Dichte der in Zweiteilchennäherung minimierten Zustände deutlich oberhalb der Dichte der Vergleichsrechnung. Die Energieminimierung in Zweiteilchennäherung sucht gerade solche Zustände mit hoher Dichte, bei denen die Zweiteilchenenergie auf Kosten höherer Mehrteilchenbeiträge abgesenkt ist.

Den endgültigen Nachweis, daß die Energieminimierung in Zweiteilchennäherung für eine realistische Beschreibung der  $^4\text{He}$ -Tröpfchen nicht ausreichend ist, liefert die explizite Betrachtung der nächsten Ordnung der Clusterentwicklung — der Dreiteilchenordnung. Auf Basis der durch Energieminimierung in Zweiteilchennäherung bestimmten

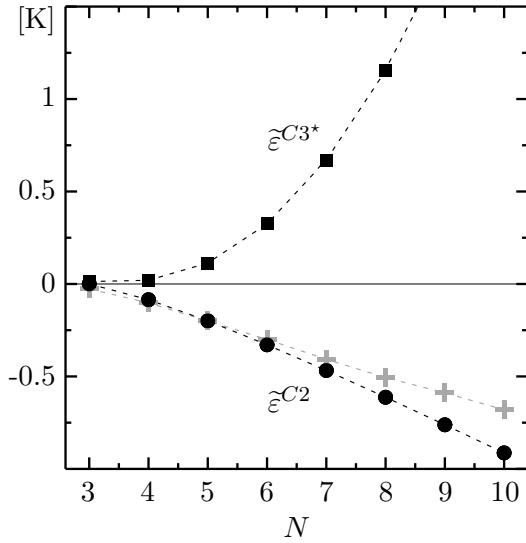


Abbildung 6.7 · Beiträge der Dreiteilchenordnung der Clusterentwicklung zur Energie für die in Zweiteilchennäherung optimierten Zustände. Dargestellt ist das Ergebnis der Energieminimierung in Zweiteilchennäherung (●) und die Energie unter Hinzunahme des Erwartungswertes der Dreiteilchenordnung (■). Zum Vergleich sind die Ergebnisse der Jastrowrechnungen [ScSc65] (+) dargestellt.

Zustände wird der Erwartungswert des Dreiteilchenteils des korrelierten Hamiltonoperators berechnet (siehe Abschnitt 6.1.4). Der Dreiteilchenbeitrag wird der Energie in Zweiteilchennäherung als Korrektur im Sinne einer Störungsrechnung zugefügt.

Wie die Abbildung 6.7 zeigt, sind die Beiträge der dritten Ordnung der Clusterentwicklung keineswegs eine kleine Korrektur für  $N > 3$ . Sie überstiegen die Bindungsenergie in Zweiteilchennäherung bei weitem, so daß die Energien in Dreiteilchennäherung durchweg positiv sind — keines der Systeme ist bezüglich der Energie in Dreiteilchennäherung gebunden.

Hieraus muß ganz eindeutig geschlossen werden, daß die Zweiteilchennäherung allein für diese Systeme ungeeignet ist. Offenbar bewirkt die Minimierung in Zweiteilchennäherung bezüglich des Breitenparameters  $a$  der Wellenfunktion ohne weitere Nebenbedingungen, daß die Energie in dieser Näherung künstlich auf Kosten der höheren Ordnungen abgesenkt wird. Es macht für diese Systeme keinen Sinn, die Energie in Zweiteilchennäherung zu minimieren, ohne ein Maß für die Beiträge der höheren Ordnungen, wie z.B. den Kleinheitsparameter, zu berücksichtigen.

### 6.2.2 Energieminimierung in Dreiteilchennäherung

Das Versagen der Zweiteilchennäherung macht die Berücksichtigung von Effekten jenseits der Zweiteilchenordnung bei der Energieminimierung notwendig — eine Möglichkeit ist die direkte Einbeziehung der Dreiteilchenordnung. Die Energieminimierung bezüglich  $a$  in Dreiteilchennäherung ist Dank der einfachen Struktur des Systems mit nur diesem einen Variationsparameter numerisch machbar. Die Berechnung der Energie in Dreiteilchennäherung folgt dem in Abschnitt 6.1.4 beschriebenen Schema.

Die Abbildungen 6.8 bis 6.10 zeigen das Resultat dieser Rechnung für die Bindungsenergie pro Teilchen, den rms-Radius und die Dichte, Resultate für Systeme größerer Teilchenzahl finden sich in Tabelle 6.1 auf Seite 123. Die Bindungsenergien für die in Dreiteilchennäherung minimierten Systeme sind einmal in Dreiteilchennäherung und in Zweiteilchennäherung angegeben. Im Gegensatz zum Resultat der Energieminimierung in Zweiteilchennäherung liegen die Energien oberhalb der Referenzwerte, d.h. die Systeme sind weniger stark gebunden, das gilt sowohl für die in Dreiteilchen- als auch für die in Zweiteilchennäherung berechnete Energie. Der Dreiteilchenbeitrag zur Energie ist

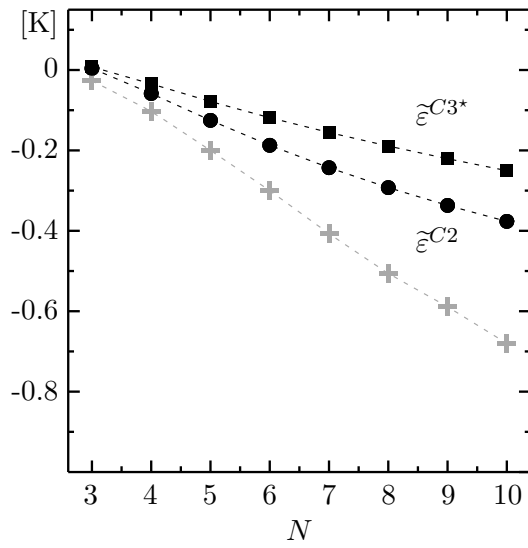


Abbildung 6.8 · Resultat der Energieminimierung in Dreiteilchennäherung. Dargestellt ist die Energie in Dreiteilchennäherung (■) und der Zweiteilchenanteil der Energie (●). Zum Vergleich die Energien der Jastrowrechnungen [ScSc65] (+).

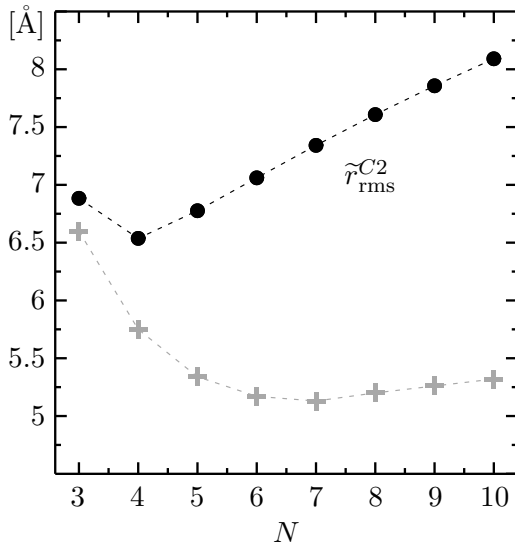


Abbildung 6.9 · rms-Radius der in Dreiteilchennäherung minimierten Zustände (●) im Vergleich zu den Ergebnissen der Jastrowrechnungen [ScSc65] (+).

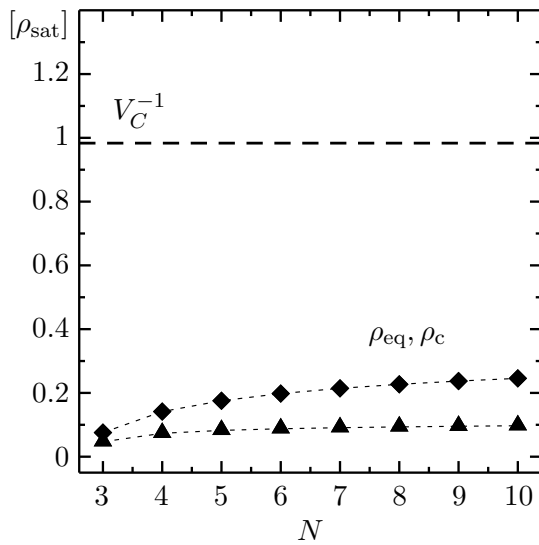


Abbildung 6.10 · Äquivalentdichte (▲) und Zentralkichte (◆) in Einheiten der Sättigungsdichte der  $^4\text{He}$ -Flüssigkeit für die in Dreiteilchennäherung energieminimalen Zustände. Desweiteren ist das inverse Korrelationsvolumen (---) dargestellt.



wesentlich geringer als bei den vorangehenden Rechnungen (siehe Abbildung 6.7) und wächst allenfalls linear mit der Teilchenzahl an. Dies bestätigt die Vermutung, daß die Minimierung in Zweiteilchennäherung bei diesen Systemen die Energie unphysikalisch um den Preis großer Beiträge in den höheren Clusterordnungen absenkt. Dem Ergebnis nach zu urteilen enthält die Dreiteilchennäherung alle wesentlichen physikalischen Beiträge, so daß eine *pathologische* Absenkung der Energie wie im vorangehenden Fall nicht auftritt. Scheinbar erfüllt die Dreiteilchenordnung die Schrankeneigenschaft des Ritzschen Variationsprinzips, denn die Variationsenergien liegen oberhalb der exakten Energien.

Als Folge der durch die Dreiteilchenbeiträge induzierten Abstoßung sind die Dichten der Tröpfchen im Vergleich zur Zweiteilchenminimierung stark reduziert, wie Abbildung 6.10 unmittelbar zeigt. Die Kleinheitsparameter sind für alle Systeme sehr klein ( $\kappa_{\text{eq}} < 0.1$ ). Hier bestätigt sich, daß der Kleinheitsparameter ein indirektes Maß für die Bedeutung der Beiträge höherer Ordnung ist — kleine Dreiteilchenbeiträge gehen mit kleinen Kleinheitsparametern einher. Eine Möglichkeit, das Versagen der Zweiteilchennäherung ohne explizite Dreiteilchenminimierung zu verhindern, wäre die Variation unter der Nebenbedingung eines kleinen Kleinheitsparameters.

Trotz einer Reihe von prinzipiellen Verbesserungen gegenüber der Energieminimierung in Zweiteilchennäherung ist die Beschreibung durch Hinzunahme der Dreiteilchennäherung noch nicht befriedigend. Die Energien liegen deutlich über den erwarteten Werten, die Bindung erreicht nur knapp die Hälfte der Referenz. Damit gehen stark überhöhte rms-Radien, d.h. zu geringe Dichten, einher. Es scheint, als sei die durch die Dreiteilchenordnung generierte Abstoßung zu stark, so daß zu hohe Energien und zu geringe Dichten erzeugt werden. Die analoge Beobachtung wurde bereits bei der Untersuchung der  $^4\text{He}$ -Flüssigkeit in Abschnitt 5.3.3 gemacht. Die Dreiteilchennäherung liefert zu wenig Bindung und eine zu geringe Dichte für den Sättigungspunkt.

Hier fallen sofort zwei Ursachen bzw. Verbesserungsmöglichkeiten ins Auge. Erstens: Die Energieminimierung in Dreiteilchennäherung wurde auf Basis des in Zweiteilchennäherung optimierten Korrelators durchgeführt. Bereits bei dessen Konstruktion wurde angemerkt, daß es für Systeme, in denen es wesentlich auf die Beiträge der Dreiteilchenordnung ankommt, notwendig ist, den Korrelator auch in Dreiteilchennäherung zu optimieren. Das ist hier nicht geschehen. Vom formalen Standpunkt des Variationsprinzips aus bilden die Korrelatorparameter neben den Parametern des unkorrelierten Zustandes zusätzliche Freiheitsgrade, die, wenn ebenfalls variiert, nur zu einer weiteren Absenkung der Energie führen können. Es ist zu erwarten, daß ein solcher, auf die Dreiteilchennäherung abgestimmter Korrelator, die Energie signifikant gegenüber dem „mißbräuchlich“ verwendeten zweiteilchenoptimalen Korrelator absenkt. Im Prinzip ist eine solche Rechnung möglich, sie ist jedoch numerisch sehr aufwendig.

Zweitens: Bei Systemen, in denen die Dreiteilchenordnung dermaßen wichtig ist, ist a priori nicht klar, daß ein Korrelator, der nur genuine Zweiteilchenkorrelationen beschreibt, ausreichend ist. Möglicherweise sind auch genuine Dreiteilchenkorrelationen nötig, um eine physikalische Beschreibung zu ermöglichen. Erneut stellen die genuinen Dreiteilchenkorrelationen in der Philosophie des Variationsprinzips zusätzliche Freiheitsgrade dar, die nur zu einer Absenkung der Energie führen können. Solche genuinen Dreiteilchenkorrelationen sind in der Methode der unitären Korrelatoren bisher nicht untersucht worden.

### 6.2.3 Energieminimierung mit dichteabhängigem Korrelator

Wie im Falle der  $^4\text{He}$ -Flüssigkeit scheint die effektive Beschreibung von Effekten der Korrelationen höherer Ordnung der vielversprechendste Weg für eine physikalische Beschreibung dieser korrelationsdominierten Systeme zu sein. Wie bereits in Abschnitt 5.3.4 soll die Dichteabhängigkeit durch eine Multiplikation der Korrelatorparameter  $\alpha$  und  $\beta$  mit einer dichteabhängigen Skalierungsfunktion der Form

$$\xi(\rho) = 1 - \gamma \rho \quad (6.18)$$

implementiert werden. Die Konstante  $\gamma$  wurde bereits durch Anpassung der Energie der  $^4\text{He}$ -Flüssigkeit bei Sättigungsdichte an das Resultat einer Monte-Carlo-Rechnung bestimmt. Entsprechend (5.34) wird im folgenden der Wert

$$\gamma = 3.696 \text{ \AA}^3 \quad (6.19)$$

verwendet. Der dichteabhängige Korrelator ist somit vollständig bestimmt, es existieren *keinerlei* freie Parameter mehr. Die Parameter  $\alpha, \beta$  und  $\eta$  sind vollständig durch Eigenschaften des Zweiteilchensystems bestimmt und der Parameter  $\gamma$  ist durch eine unabhängige Rechnung für das unendliche System festgelegt. Die folgenden Rechnungen stellen also eine echte, parameterfreie *Vorhersage* der Eigenschaften von  $^4\text{He}$ -Tröpfchen endlicher Größe dar.

Die einzige verbleibende Problem ist eine geeignete Definition der Dichte für inhomogene, endliche Systeme. Für die Rechnungen in homogener Materie ist die Dichte ein wohldefinierter Parameter, dagegen ist sie in inhomogenen Systemen allenfalls lokal in gleicher Weise definiert. Im Prinzip ist es möglich, den dichteabhängigen Korrelator im Sinne einer Lokalen-Dichte-Näherung einzusetzen, das soll hier jedoch wenn möglich vermieden werden. Daher wird ein Maß für die mittlere Dichte des Tröpfchens benötigt. Das Mittel der Wahl ist die bereits zur Definition des Kleinheitsparameters verwendete Äquivalentdichte  $\rho_{\text{eq}}$  (6.16). Sie ist definiert als Dichte der sphärischen Kastenverteilung mit gleichem rms-Radius und gleicher Teilchenzahl. Eine andere mögliche Wahl wäre die Dichte im Zentrum des Tröpfchens, d.h. die Maximaldichte des Systems — sie ist zwar kein geeigneter Repräsentant für die mittlere Dichte des Tröpfchens, soll aber zu Vergleichszwecken hier ebenfalls behandelt werden.

Die Energieminimierung kann nun unter Verwendung des dichteabhängigen Korrelators in Zweiteilchennäherung direkt numerisch ausgeführt werden, die Ergebnisse sind in den Abbildungen 6.11 bis 6.13 zusammengestellt, weitere Resultate finden sich in Tabelle 6.1. Die in der ersten Abbildung gezeigten Bindungsenergien unter Einbeziehung der Äquivalentdichte-Abhängigkeit (gefüllte Symbole) sind in ausgezeichneter Übereinstimmung mit den Referenzdaten. Es sei nochmals betont: Es handelt sich hier um eine Rechnung ohne jegliche Parameteranpassung — der Korrelator ist komplett durch Eigenschaften des Zweiteilchensystems und der unendlichen Flüssigkeit bestimmt worden. Die entsprechende Rechnung durchgeführt mit der Zentraldichte statt der Äquivalentdichte liefert systematisch schlechtere Resultate (offene Symbole). Das bestätigt die Annahme, daß die Äquivalentdichte als Maß für die mittlere Dichte am ehesten mit der eindeutig definierten Dichte der homogenen Flüssigkeit vergleichbar ist.

Seien nun die Ergebnisse unter Verwendung der Äquivalentdichte  $\rho_{\text{eq}}$  eingehender diskutiert. Die Energie stimmt mit einer Abweichung von maximal 0.02 K mit den Referenzwerten überein. Bei diesen Größenordnungen ist nicht mehr zu sagen, ob die Referenzrechnung, die auf einer Monte-Carlo-Methode beruht, noch hinreichend genau

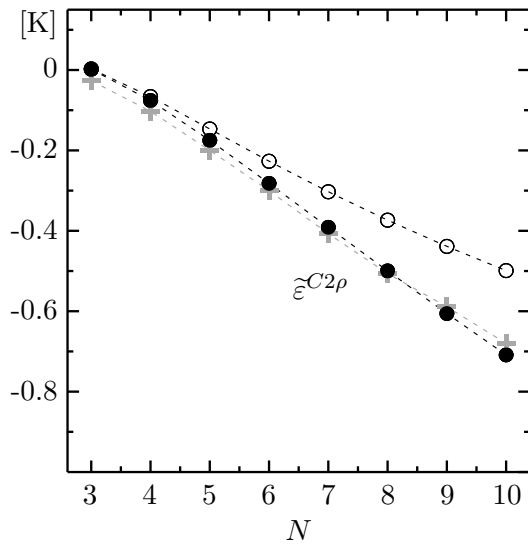


Abbildung 6.11 · Resultat der Energieminimierung in Zweiteilchennäherung mit dichteabhängigem Korrelator für die Energie pro Teilchen. Verwendet wird die in  $^4\text{He}$ -Flüssigkeit fixierte Dichteabhängigkeit, wobei die Äquivalentdichte (●) bzw. der Zentraldichte (○) des Tröpfchens eingesetzt wird. Zum Vergleich die Energien der Jastrowrechnungen [ScSc65] (⊕).

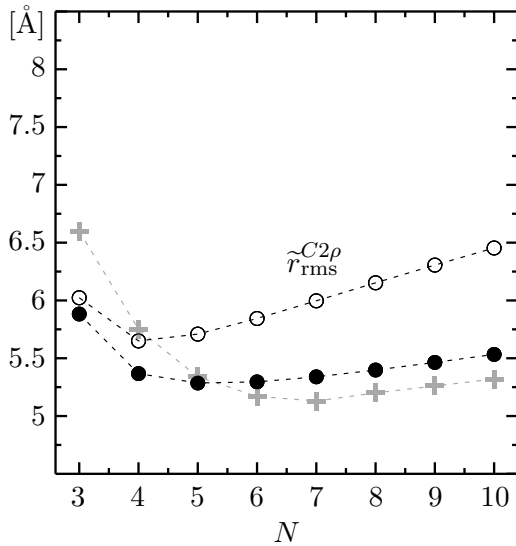


Abbildung 6.12 · rms-Radius der in Zweiteilchennäherung mit dichteabhängigem Korrelator minimierten Zustände unter Verwendung der Äquivalentdichte (●) bzw. der Zentraldichte (○) des Tröpfchens und die Ergebnisse der Jastrowrechnungen [ScSc65] (⊕).

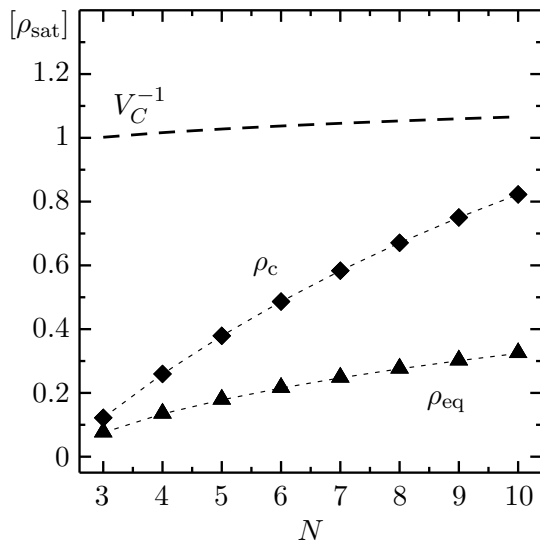


Abbildung 6.13 · Äquivalentdichte (▲) und Zentraldichte (◆) in Einheiten der Sättigungsdichte der  $^4\text{He}$ -Flüssigkeit für die energieminimalen Zustände mit dichteabhängigem Korrelator formuliert mit der Äquivalentdichte, sowie das inverse Korrelationsvolumen des dichteabhängigen Korrelators (---).

ist. Lediglich im Bereich kleiner Teilchenzahlen  $N \leq 5$  scheint die Variationsrechnung mit dichteabhängigem Korrelator zu geringe Bindungsenergien zu liefern, das  $N = 3$ -System ist sogar ungebunden. Ein ähnlicher Effekt war bereits bei der Zweiteilchennäherung mit statischem Korrelator zu beobachten. Der Grund hierfür liegt eindeutig in der mangelnden Flexibilität der Versuchszustandes, der einparametrischen Gaußfunktion. Sie ist nicht in der Lage die exponentiell abfallenden Schwänze der exakten Wellenfunktionen für derart schwach gebundene Systeme ausreichend zu simulieren. Hier würde einer flexiblere Ansatzfunktion, die einen schwächerem langreichweitigen Abfall, d.h. eine diffusere Oberfläche erlaubt, mit großer Sicherheit Abhilfe schaffen. Das bestätigen auch die rms-Radien, die für  $N < 5$  trotz der zu geringen Bindungsenergie zu klein sind, auch hier würde ein schwächerer langreichweitiger Abfall als ihn die Gaußfunktion beschreibt eine Verbesserung bringen.

Bei großen Teilchenzahlen deutet sich eine minimale Überbindung im Vergleich zu den Referenzwerten an. Hier kann jedoch vermutet werden, daß die Referenzdaten nicht ausreichend genau sind, d.h. daß durch die verwendeten Monte-Carlo-Verfahren wirklich das Minimum mit der nötigen Genauigkeit gefunden werden konnte. Die rms-Radien in Abbildung 6.12 zeigen eine kleine aber systematische Abweichung: Sie liegen für  $N > 6$  und etwa  $0.25\text{\AA}$  über der Referenz. Da die Radien vorrangig auf die äußeren Teile der Wellenfunktion sensitiv sind, ist in erster Linie die Versuchswellenfunktion und nicht der Korrelator maßgebend. Vermutlich ist die Ursache dieser kleinen Abweichung erneut in der mangelnden Flexibilität der Versuchswellenfunktion zu suchen.

Schließlich sind in Abbildung 6.13 die Äquivalentdichte, die Zentraldichte und das inverse Korrelationsvolumen in Einheiten der Sättigungsdichte der homogenen  $^4\text{He}$ -Flüssigkeit dargestellt. Da der Korrelator selbst von der Dichte abhängt, ist auch das Korrelationsvolumen dichteabhängig. Obwohl die Dichteabhängigkeit massiven Einfluß auf die Energien und Radien der Tröpfchen hat, ist das Korrelationsvolumen nur schwach veränderlich — der Einfluß auf die Struktur des Korrelationslochs ist also eher klein.

Die Dichten blieben für die untersuchten Teilchenzahlen unter einem Drittel der Dichte der Flüssigkeit, für die die Dichteabhängigkeit des Korrelators fixiert worden ist. Die gute Übereinstimmung der Energien beweist damit, daß die gewählte Form der Dichteabhängigkeit auch für wesentlich geringere Dichten noch gültig ist. Damit ist gezeigt, daß die Dichteabhängigkeit einen *universellen* Charakter hat, d.h. sie ist nicht nur zur Beschreibung eines sehr speziellen Systems geeignet, sondern sie ist mit ein für allemal fixierten Parametern für eine Vielzahl von Systemen — homogene Flüssigkeit bei hohen Dichten ebenso wie Tröpfchen mit wenigen Teilchen bei deutlich niedrigeren Dichten — anwendbar. Das ist ein Hinweis, daß die Dichteabhängigkeit tiefe physikalische Bedeutung besitzt.

Zum Abschluß der Untersuchungen zu atomaren  $^4\text{He}$ -Systemen werden in Tabelle 6.1 die wesentlichen Resultate für kleine  $^4\text{He}$ -Tröpfchen nochmals zusammengefaßt. Neben den bisher gezeigten Ergebnissen sind Systeme bis zu  $N = 70$  aufgeführt. Im Prinzip kann die Rechnung für beliebig hohe Teilchenzahlen durchgeführt werden, jedoch ist zu erwarten, daß der gaußförmige Ansatzzustand für größere Teilchenzahlen nicht geeignet ist. Verschiedene Rechnungen, unter anderem von V.R. Pandharipande, S.C. Pieper und R.B. Wiringa [PaPi86] oder E. Krotscheck und S.A. Chin [KrCh95] auf Basis des Aziz-Potentials, zeigen, daß die Dichte bei Teilchenzahlen  $N > 70$  im Inneren des Tröpfchens konstant wird und den Wert der homogenen  $^4\text{He}$ -Flüssigkeit annimmt. Für ein solches abgeflachtes Dichteprofil ist der Gaußansatz nicht geeignet, man müßte zum Beispiel

	Energiminimierung für ${}^4\text{He}$ -Tröpfchen in												Referenz		
	Zweiteilchennäherung			Dreiteilchennäherung			dichteabhängiger Zweiteilchennäherung								
$N$	$a$	$\tilde{\varepsilon}^{C2}$	$\tilde{r}_{\text{rms}}^{C2}$	$a$	$\tilde{\varepsilon}^{C3^*}$	$\tilde{r}_{\text{rms}}^{C2}$	$a$	$t_{\text{int}}$	$\tilde{t}_r$	$\tilde{u}$	$\tilde{v}$	$\tilde{\varepsilon}^{C2\rho}$	$\tilde{r}_{\text{rms}}^{C2\rho}$	$\varepsilon^{\text{ref}}$ [SSc65]	$r_{\text{rms}}^{\text{ref}}$
3	32.33	+0.000	5.71	47.33	+0.004	6.88	34.39	0.176	0.005	0.238	-0.418	+0.002	5.88	-0.027	6.60
4	22.83	-0.085	5.12	37.73	-0.058	6.54	25.19	0.271	0.021	0.551	-0.919	-0.076	5.37	-0.103	5.75
5	19.81	-0.199	4.97	37.95	-0.125	6.78	22.70	0.320	0.038	0.846	-1.379	-0.175	5.29	-0.200	5.34
6	18.26	-0.329	4.90	39.53	-0.187	7.06	21.71	0.349	0.054	1.122	-1.807	-0.282	5.30	-0.300	5.17
7	17.31	-0.468	4.88	41.55	-0.243	7.34	21.32	0.366	0.067	1.378	-2.202	-0.391	5.34	-0.407	5.13
8	16.67	-0.613	4.87	43.71	-0.293	7.61	21.23	0.375	0.079	1.614	-2.567	-0.500	5.40	-0.506	5.20
9	16.20	-0.761	4.88	45.92	-0.337	7.86	21.31	0.379	0.088	1.832	-2.905	-0.606	5.46	-0.589	5.26
10	15.84	-0.913	4.89	48.12	-0.377	8.09	21.50	0.380	0.096	2.033	-3.218	-0.709	5.53	-0.680	5.32
20	14.42	-2.500	5.14	67.57	-0.639	9.76	25.13	0.343	0.118	3.427	-5.442	-1.554	6.20		
30	14.01	-4.125	5.44	81.92	-0.811	10.66	29.15	0.301	0.109	4.221	-6.778	-2.146	6.75		
40	13.81	-5.760	5.74	92.54	-0.958	11.19	32.97	0.269	0.098	4.745	-7.698	-2.588	7.20		
50	13.69	-7.399	6.02	100.63	-1.098	11.52	36.59	0.243	0.085	5.119	-8.381	-2.933	7.60		
60	13.61	-9.040	6.29	106.90	-1.969	11.74	40.02	0.223	0.076	5.405	-8.918	-3.214	7.95		
70	13.56	-10.683	6.55	112.05	-2.470	11.90	43.29	0.207	0.068	5.631	-9.353	-3.447	8.26		

Tabelle 6.1 · Resultate der Energiminimierung für kleine  ${}^4\text{He}$ -Tröpfchen in Zwei- und Dreiteilchennäherung und mit dichteabhängigem Korrelator in Zweiteilchennäherung. Energieerwartungswerte sind pro Teilchen in [K], Breitenparameter in [ $\text{\AA}^2$ ] und rms-Radien in [ $\text{\AA}$ ] angegeben.

zu einer Woods-Saxon-Form übergehen.

Die Tabelle verdeutlicht, daß der dichteabhängige Korrelator die einzige Möglichkeit ist, mit geringem numerischen Aufwand diese korrelationsdominierten Systeme zu beschreiben. Trotz der geringen rechentechnischen Anforderungen sind die Ergebnisse ausgesprochen überzeugend und durchaus mit Resultaten aufwendiger Monte-Carlo-Variationsmethoden vergleichbar. Das demonstriert, wie mächtig die Methode der unitären Korrelatoren selbst bei Systemen mit extrem starken Korrelationen ist.

*Teil II*

---

*Effektive Kontaktwechselwirkungen  
für verdünnte atomare Fermigase  
in externen Potentialen*





## Einleitung zu Teil II

In den letzten 5 Jahren hat die experimentelle Forschung rund um ultrakalte atomare Gase in externen Potentialen eine rasante Entwicklung erfahren. Im Jahre 1995 war es erstmals gelungen, ein System von ca.  $10^4$  neutralen  $^{87}\text{Rb}$ -Atomen in einer magnetischen Falle auf Temperaturen weit unter einem Mikrokkelvin zu kühlen [AnEn95]. Da dieses Isotop einen ganzzahligen Gesamtdrehimpuls trägt, gehorcht das Gas bei niedrigen Temperaturen der Bose-Einstein-Statistik. In dem zitierten Experiment wurde erstmals der Übergang der Atome in den energetisch niedrigsten Einteilchenzustand, d.h. die Bildung eines Bose-Einstein-Kondensates, in derartigen Systemen beobachtet. Seitdem ist es in vielen Labors zur Routine geworden, Bose-Einstein-Kondensate mit verschiedensten Elementen, vorrangig den bosonischen Isotopen der Alkalimetalle, zu produzieren und für vielfältige Sekundärexperimente zu nutzen. Eine umfassende Darstellung der verschiedenen experimentellen Techniken findet sich in den Übersichtsartikeln [KeDu99, CoEn99], einen Überblick über die theoretischen Methoden gibt [DaGi99].

Das besondere experimentelle und theoretische Interesse an diesen Systemen gründet sich auf die Tatsache, daß deren *makroskopische* Eigenschaften von *quantenmechanischen* Effekten bestimmt werden. Dazu kommen die für quantenmechanische Vielteilchensysteme einzigartigen Möglichkeiten, experimentell auf die relevanten Parameter Einfluß zu nehmen. So können Teilchenzahlen, Dichten und Zusammensetzung der Kondensate, Fallengrößen und Geometrien nahezu beliebig eingestellt werden. Besonders interessant ist, daß sogar die Stärke der Atom-Atom-Wechselwirkung, ausgedrückt durch deren Partialwellenstreulänge, experimentell in einem weiten Bereich variiert werden kann [CoCl00], auch das Umschalten von anziehenden zu effektiv abstoßenden Wechselwirkungen ist möglich. Die Nachweismethoden sind nicht weniger beeindruckend, so können die Kondensate mit optischen Methoden abgebildet werden. Aus diesen Aufnahmen lassen sich direkt Dichteprofile und Impulsverteilungen rekonstruieren, die unter anderem Aufschluß über Teilchenzahl und Temperatur geben. Es ist sogar möglich, diese Abbildungsverfahren nahezu zerstörungsfrei — in situ — anzuwenden, so daß die Dynamik des Kondensates zeitaufgelöst beobachtet werden kann. Auf diese Weise ist es gelungen, unter anderem die Bildung der kondensierten Phase, Schwingungsmoden des Kondensates und die Dynamik von Vortizes sichtbar zu machen.

Nach den Erfolgen bei der Produktion ultrakalter bosonischer Gase versucht man Fermigase unter ähnlichen Bedingungen zu präparieren. Das große experimentelle Hemmnis auf diesem Weg ist, daß die für Bosonen sehr effizienten Kühlmechanismen, im wesentlichen die sog. Evaporationskühlung, bei Fermionen nur begrenzt anwendbar sind. Das Pauliprinzip unterdrückt bei niedrigen Temperaturen s-Wellenstreuungen zwischen gleichartigen Atomen, was die Effizienz der Evaporationskühlung stark einschränkt. Es bedarf einiger Tricks, wie z.B. das simultane Kühlen zweier Fermionensorten [HoDe99, GeId99] bzw. einer Mischung aus Bosonen und Fermionen [MeFe00] oder die Erhöhung der relevanten Streuquerschnitte [MaYo98, CoFr98, Bohn00], um in Fer-

migasen ähnlich niedrige Temperaturen zu erreichen. Im Herbst 1999 war es erstmals gelungen, ein System von  $10^6$  fermionischen  $^{40}\text{K}$ -Atomen auf Temperaturen von  $0.3\,\mu\text{K}$  zu kühlen [DeJi99]. Diese Temperatur entspricht etwa der Hälfte der Fermienergie des Systems, d.h. der größte Teil der Teilchen befindet sich in Einteilchenzuständen unterhalb des Fermiimpulses. Das System nähert sich der idealisierten Beschreibung durch ein wechselwirkendes inhomogenes Fermigas bei  $T = 0\,\text{K}$  an. Eines der Hauptinteressen bei der Untersuchung ultrakalter Fermigase richtet sich auf die Suche nach einer superfluiden Phase [StHo98, HoFe97]. Es wird erwartet, daß es für gegenwärtig realisierte Dichten bei Temperaturen in der Größenordnung einiger Nanokelvin zur Bildung von Cooperpaaren aus zwei fermionischen Atomen kommt, die wiederum ein Bose-Einstein-Kondensat bilden können. Durch Kompression des kalten Fermigases [ViGi00] könnte diese Übergangstemperatur noch deutlich angehoben werden.

Es ist an dieser Stelle hilfreich, sich einen Überblick über die Skalen der relevanten Parameter dieser Systeme zu verschaffen. Die folgende Tabelle gibt derzeit typische Größenordnungen an, die prinzipiell sowohl für bosonische als auch für fermionische Atome gelten:

Atomares Gas		Fallenpotential	Wechselwirkung
Temperatur $T \sim 0.1 \dots 2\,\mu\text{K}$	Dichte $\rho \sim 10 \dots 10^3\,\mu\text{m}^{-3}$	Oszillatorfrequenz $\omega \sim 10 \dots 1000\,\text{Hz}$	Reichweite $\lambda \sim 10^{-3}\,\mu\text{m}$
Teilchenzahl $N \sim 10^4 \dots 10^8$	Teilchenabstand $d \sim 0.1 \dots 1\,\mu\text{m}$	Oszillatorlänge $\ell \sim 0.5 \dots 5\,\mu\text{m}$	s-Wellenstreulänge $a_0 \sim -0.1 \dots 0.1\,\mu\text{m}$
Lebensdauer $\tau \sim 1 \dots 100\,\text{s}$	Radius $R \sim 1 \dots 100\,\mu\text{m}$	Niveauabstand $\Delta \sim 0.1 \dots 10\,\text{nK}$	MF-Energie <sup>1</sup> $U_{\text{int}}/N \sim 0 \dots 1\,\mu\text{K}$

Daraus lassen sich einige phänomenologische Eigenschaften der ultrakalten atomaren Gase ableiten:

- Die Teilchenzahlen können recht groß sein, so daß es sich um mesoskopische oder gar makroskopische Systeme handelt. Gleichzeitig sind die Temperaturen so niedrig, daß die thermische Wellenlänge oder typische inverse Impulse in der Größenordnung des mittleren Teilchenabstandes liegen. Damit bestimmen quantenmechanische Vielteilcheneffekte die Eigenschaften der Gase — es handelt sich um *makroskopische Quantensysteme*.
- Der mittlere Teilchenabstand ist sehr groß gegenüber der Reichweite der Atom-Atom-Wechselwirkung, d.h. es handelt sich um *stark verdünnte* Gase. Dennoch spielt die Wechselwirkung eine wichtige Rolle, da die Streulänge wesentlich größer als die Wechselwirkungsreichweite sein kann und fast bis an den mittleren Teilchenabstand heranreicht. Darüber hinaus liegt die resultierende Mean-Field-Wechselwirkungsenergie in der Größenordnung der Temperatur, so daß Wechselwirkungseffekte deutlichen Einfluß haben.

<sup>1</sup>Die Mean-Field-Energie pro Teilchen wird durch das Produkt aus Dichte und s-Wellenwechselwirkungsstärke  $g_0 = 4\pi a_0/m$  abgeschätzt.

- Das verdünnte atomare Gas befindet sich in einem *nicht-selbstgebundenen, metastabilen* Zustand. Im allgemeinen besitzt die Atom-Atom-Wechselwirkung einige gebundene Zweiteilchenzustände und damit auch gebundene Vielteilchenzustände. Der absolute Grundzustand des Systems ist also ein selbstgebundenes Tröpfchen (oder wie im Fall der Alkalimetalle ein Kristall) hoher Dichte.
- Die Lebensdauer ist relativ groß und ermöglicht neben der Untersuchung der statischen Eigenschaften auch das Studium dynamischer Effekte. Sie wird durch Kollisionen der kalten Atome mit heißen Restgasatomen sowie durch Dreiteilchenstöße der kalten Atome, die zur Bildung gebundener Zweiteilchenzustände führen, begrenzt.

Dieser Teil der Arbeit beschränkt sich auf die Untersuchung der Eigenschaften (nicht-superfluider) ultrakalter Fermigase bestehend aus einer oder mehreren Komponenten, die sich z.B. durch die magnetische Gesamtdrehimpulsquantenzahl unterscheiden. Aufgrund des externen Magnetfeldes sind die Niveaus zu verschiedenen magnetischen Drehimpulsquantenzahlen energetisch aufgespalten und Übergänge zwischen ihnen sind unterdrückt. Atome mit verschiedenen magnetischen Quantenzahlen können damit als unterscheidbare Teilchen behandelt werden.

Das Hauptaugenmerk richtet sich auf den Einfluß der Wechselwirkung auf die Struktur und Stabilität des Fermigases bei  $T = 0$  K. Im Unterschied zu den ultrakalten Bosegasen, sind s-Wellenstreuungen im einkomponentigen Fermigas aufgrund des Pauliprinzipis unterdrückt. Folglich stellt die p-Welle die führende Wechselwirkungsordnung dar. Als Ausgangspunkt für eine konsistente Mean-Field-Beschreibung der ein- und mehrkomponentigen Fermigase wird in Kapitel 7 eine *effektive Kontaktwechselwirkung* für alle Partialwellen abgeleitet [RoFe00b, RoFe00a]. Sie ist so konstruiert, daß ihre Erwartungswerte in freien Zweiteilchenzuständen das exakte Energiespektrum für alle Partialwellen reproduzieren.

Ausgehend vom s- und p-Wellenteil der effektiven Kontaktwechselwirkung wird in Kapitel 8 das Energiefunktional des mehrkomponentigen Fermigases in Thomas-Fermi-Näherung abgeleitet. Damit werden in Kapitel 9 die Grundzustandseigenschaften verdünnter wechselwirkender ein- und zweikomponentiger Fermigase untersucht. Neben dem allgemeinen Einfluß der s- und p-Wellenwechselwirkung wird die Stabilität des Fermigases gegen den Kollaps in einen Zustand hoher Dichte infolge anziehender Wechselwirkungen diskutiert. Hierfür werden explizite Stabilitätsbedingungen als Funktion der Partialwellenstreuulänge, des Fermiimpulses bzw. der Dichte und der Teilchenzahl abgeleitet. Im zweikomponentigen System wird darüber hinaus die Stabilität gegen räumliche Separation der beiden Komponenten infolge abstoßender s- bzw. p-Wellenwechselwirkungen diskutiert, auch hier werden explizite Stabilitätsbedingungen angegeben.

Die Untersuchungen zeigen, daß die p-Wellenwechselwirkung in verdünnten ultrakalten Fermigasen von außerordentlich großer Bedeutung sein kann. Im einkomponentigen System bildet sie den führenden Wechselwirkungsterm und bewirkt, sofern anziehend, bei hohen Teilchenzahlen eine Instabilität des Systems gegen Kollaps. Im zweikomponentigen System erzeugt das Zusammenspiel zwischen s- und p-Wellenwechselwirkung eine Reihe neuartiger Phänomene, die sich in einem reichhaltigen Phasendiagramm widerspiegeln, z.B. eine p-wellenstabilisierte Hochdichtephase im Zentrum der Falle.

Daraus ist zu folgern, daß die p-Wellenwechselwirkung unbedingt in Betracht gezogen werden muß. Selbst wenn die entsprechende Streulänge nur einen Bruchteil der s-Wellenstreuulänge ist, kann sie zu signifikanten Effekten führen.

## Effektive Kontaktwechselwirkungen für verdünnte Quantengase

### 7.1 Konzeption

Im vorangehenden Teil wurde mit der Methode der unitären Korrelatoren ein Werkzeug vorgestellt, um eine effektive Wechselwirkung für dichte, selbstgebundene Systeme abzuleiten. Bei diesen Systemen ist die detaillierte Struktur der Zweiteilchenwechselwirkung von Bedeutung, da Wechselwirkungsreichweite und mittlerer Teilchenabstand in der gleichen Größenordnung liegen.

Bei den hier behandelten verdünnten ultrakalten Fermigasen bewegt man sich in einem gänzlich anderen Regime: Erstens sind die zu beschreibenden Systeme nicht selbstgebunden, sondern werden durch ein äußeres Potential zusammengehalten. Zweitens ist die Reichweite  $\lambda$  der Atom-Atom-Wechselwirkung mit weniger als  $10\text{\AA}$  klein gegenüber dem mittleren Teilchenabstand  $\rho^{-1/3}$  und der typischen Wellenlänge  $q^{-1}$  der Relativbewegung zweier Teilchen

$$\lambda \ll \rho^{-1/3} \quad \text{und} \quad \lambda \ll q^{-1}. \quad (7.1)$$

Das ist eine Folge der Tatsache, daß die Gase stark *verdünnt* und extrem *kalt* sind. Für fermionische Systeme im Grundzustand sind diese beiden Eigenschaften gleichbedeutend mit der Aussage, daß die Reichweite der Wechselwirkung klein gegenüber dem inversen Fermiimpuls des Systems ist. Selbst bei den höchsten Dichten, die in der Diskussion der folgenden Kapitel auftreten, liegen die inversen Fermiimpulse um ein bis zwei Größenordnungen über der Wechselwirkungsreichweite.

Diese Eigenschaften haben überaus wichtige Konsequenzen für die theoretische Beschreibung derartiger Systeme: Die Relativwellenfunktion zweier Atome des Vielteilchensystems ist verglichen mit der Wechselwirkungsreichweite so weit ausgedehnt und so schwach veränderlich, daß die detaillierte Struktur des Zweiteilchenpotentials nicht aufgelöst werden kann. Vielmehr erfahren die Teilchen eine in gewissem Sinne gemittelte Wechselwirkung. Darüber hinaus spielen Zweikorrelationen (vgl. Teil I der Arbeit) aufgrund der geringen Dichte nur eine untergeordnete Rolle. Drei- und Mehrteilchenkorrelationen sind völlig vernachlässigbar. Daher können diese Systeme sehr gut im Rahmen eines *Mean-Field-Modells* mit einer angemessen gewählten effektiven Wechselwirkung behandelt werden.

Da das Vielteilchenproblem im vollen Hilbertraum nicht gelöst werden kann, ist man gezwungen den Hilbertraum physikalisch motiviert einzuschränken. Der so definierte *Modellraum* muß hinreichend vielfältig sein, um alle relevanten Eigenschaften des Vielteilchensystems beschreiben zu können, aber gleichzeitig so einfach, daß er eine effiziente Lösung des eingeschränkten Vielteilchenproblems erlaubt. Im Falle einer Mean-Field-Näherung, die für verdünnte ultrakalte Quantengase physikalisch angemessen ist, wird der Modellraum von den Einteilchen-Produktzuständen entsprechender Permutationssymmetrie gebildet. Dieser Modellraum deckt nur einen kleinen Teil des gesamten Hilbertraumes ab, insbesondere ist der exakte Vielteilchenzustand des wechselwirkenden Systems nicht in diesem Modellraum enthalten. Eine Komponente des exakten Vielteilchenzustandes, die nicht innerhalb des Modellraums beschrieben werden kann, sind die von der Wechselwirkung induzierten kurzreichweitigen Korrelationen, die bereits im ersten Teil dieser Arbeit behandelt wurden. Infolgedessen sind die Modellraum-Matrixelemente des vollen Zweiteilchenpotentials, das durch eine van-der-Waals-Wechselwirkung mit starker kurzreichweitischer Abstoßung gegeben ist, hochgradig divergent. Die Anwendung des Mean-Field-Konzepts erfordert die Konstruktion einer geeigneten *effektiven Wechselwirkung*. In diesem Fall ist eine effektive Zweiteilchenwechselwirkung völlig ausreichend, da Drei- und Mehrteilchenkorrelationen aufgrund der geringen Dichte des Systems keine Rolle spielen.

Neben allgemeinen Symmetrieforderungen, wie Translations-, Rotations- und Galileiinvarianz, sowie Invarianz gegenüber Zeit- und Paritätsumkehr und Hermitezität, orientiert sich die Konstruktion der effektiven Wechselwirkung an den physikalischen Eigenschaften des Systems und den relevanten Observablen. Hier lassen die ultrakalten verdünnten Quantengase recht großen Spielraum. Da die detaillierte Struktur der Wechselwirkung nicht von Belang ist, kann die Radialabhängigkeit der effektiven Wechselwirkung so gewählt werden, daß die Berechnung ihrer Matrixelemente in den Modellraumzustände so einfach wie möglich wird. In diesem Falle bietet sich eine *Kontaktwechselwirkung* an, die nur für verschwindenden Relativabstand einen Beitrag liefert. Die Stärke dieser effektiven Kontaktwechselwirkung spiegelt den integralen Effekt der exakten Zweiteilchenwechselwirkung auf die Zustände des Systems wider. Besonderes Augenmerk gilt den in der Anwendung relevanten Observablen, die in diesem Falle im wesentlichen mit dem Energiespektrum des Vielteilchensystems verknüpft sind. Es liegt also nahe, die Stärke der Kontaktwechselwirkung so zu wählen, daß ihre Erwartungswerte in den Modellraumzuständen mit dem exakten Energiespektrum verknüpft sind.

Dieser Punkt ist das zentrale Kriterium für die Definition der effektiven Kontaktwechselwirkung und soll anhand des Zweiteilchensystems konkretisiert werden. Der Hamiltonoperator zerfällt in den Relativanteil der kinetischen Energie  $\mathbf{t}_{\text{rel}}$  und den Operator der vollen Zweiteilchenwechselwirkung  $\mathbf{v}$ . Der Schwerpunktsteil der kinetischen Energie sei hier bereits abgespalten. Des Spektrum des wechselwirkungsfreien Zweiteilchensystems ist durch das Eigenwertproblem von  $\mathbf{t}_{\text{rel}}$  definiert:

$$\mathbf{t}_{\text{rel}} |\phi_{nl}\rangle = E_{nl} |\phi_{nl}\rangle, \quad (7.2)$$

dabei bezeichnet  $n$  die Hauptquantenzahl und  $l$  die Drehimpulsquantenzahl. Entsprechend ergibt sich das Energiespektrum des Zweiteilchensystems mit Wechselwirkung aus dem Eigenwertproblem des vollen Hamiltonoperators

$$(\mathbf{t}_{\text{rel}} + \mathbf{v}) |\bar{\phi}_{nl}\rangle = \bar{E}_{nl} |\bar{\phi}_{nl}\rangle = (E_{nl} + \Delta E_{nl}) |\bar{\phi}_{nl}\rangle, \quad (7.3)$$

wobei  $\Delta E_{nl} = \bar{E}_{nl} - E_{nl}$  die Energieverschiebung gegenüber dem wechselwirkungsfreien Spektrum beschreibt. Die Stärke der effektiven Kontaktwechselwirkung soll derart gewählt sein, daß ihre Erwartungswerte in den Modellraumzuständen das exakte Energiespektrum reproduziert — wenigstens in einer gewissen Näherung. Für das Zweiteilchensystem wird der dem Mean-Field-Modell entsprechende Modellraum durch die wechselwirkungsfreien Zustände  $|\phi_{nl}\rangle$  gebildet. Damit gilt für den Erwartungswert des effektiven Hamiltonoperators die Forderung

$$\langle \phi_{nl} | \mathbf{t}_{\text{rel}} + \mathbf{v}^{\text{eff}} | \phi_{nl} \rangle \stackrel{!}{=} \bar{E}_{nl}. \quad (7.4)$$

Unter Ausnutzung der Tatsache, daß die Modellraumzustände gerade Eigenzustände zu  $\mathbf{t}_{\text{rel}}$  sind, reduziert sich die Bedingung auf

$$\langle \phi_{nl} | \mathbf{v}^{\text{eff}} | \phi_{nl} \rangle \stackrel{!}{=} \Delta E_{nl}. \quad (7.5)$$

Damit läßt sich das Konzept der effektiven Kontaktwechselwirkung wie folgt zusammenfassen:

- Da die Reichweite der Wechselwirkung klein gegen den mittleren Teilchenabstand ist, sind Mehrteilchenkorrelationen vernachlässigbar und das System kann im Rahmen eines Mean-Field-Modells mit einer effektiven Zweiteilchenwechselwirkung beschrieben werden.
- Da die Teilchen die detaillierte Struktur des Zweiteilchenpotentials nicht auflösen, kann die effektive Wechselwirkung als Kontaktwechselwirkung, d.h. Wechselwirkung verschwindender Reichweite, angesetzt werden.
- Die Stärke der Kontaktwechselwirkung wird so gewählt, daß ihr Erwartungswert in den Mean-Field-Zuständen gleich der exakten Energieverschiebung  $\Delta E_{nl}$  der Zustände mit Wechselwirkung gegenüber den freien Zuständen ist.

## 7.2 Ableitung der effektiven Kontaktwechselwirkung

Ausgehend von der anhand des physikalischen Systems motivierten Konzeption wird in diesem Abschnitt die analytische Form der effektiven Kontaktwechselwirkung konstruiert. Unter der Annahme einer Randbedingung für die Relativwellenfunktion des Zweiteilchensystems bei großen Abständen bilden die freien Zustände ein diskretes Spektrum mit positiven Energien  $E_{nl}$ . Die Wechselwirkung wirkt sich außerhalb der Potentialreichweite  $\lambda$  nur in Form der Streuphasen  $\eta_l(q)$  aus, wobei  $q$  den Betrag des Relativimpulses im Zweiteilchensystem beschreibt. Die für die Ableitung der effektiven Wechselwirkung wesentliche Konsequenz ist die Verschiebung des Energiespektrums mit Wechselwirkung  $\bar{E}_{nl}$  gegenüber dem freien Spektrum  $E_{nl}$ . Die möglicherweise in der vollen Wechselwirkung enthaltenen gebundenen Zustände werden nicht berücksichtigt, da die effektive Wechselwirkung nur auf Zustände positiver Energie angewendet werden soll. Ist die Energieverschiebung  $\Delta E_{nl}$  als Funktion der Streuphasen bestimmt, so kann in einem zweiten Schritt eine Kontaktwechselwirkung konstruiert werden, deren Erwartungswerte in den freien Streuzuständen gerade durch die Energieverschiebungen gegeben ist.

### 7.2.1 Darstellung der Energieverschiebung

Man betrachte ein System zweier Teilchen, die mittels eines beliebigen Zweiteilchenpotentials  $v(r)$  mit endlicher Reichweite  $\lambda$  wechselwirken. Die Relativwellenfunktion  $\phi_{nlm}(r)$  der beiden Teilchen ist Lösung der Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{1}{2\mu}\vec{\nabla}^2 + v(r)\right)\phi_{nlm}(\vec{r}) = E_{nl} \phi_{nlm}(\vec{r}). \quad (7.6)$$

$n$  bezeichnet die Hauptquantenzahl,  $l$  und  $m$  die Drehimpulsquantenzahlen und  $\mu$  die reduzierte Masse der Teilchen. Die Schrödingergleichung kann wegen der Rotationssymmetrie des Potentials in Radial- und Winkelanteil separiert werden:

$$\phi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\Omega). \quad (7.7)$$

Der Winkelteil ist durch die Kugelflächenfunktionen  $Y_{lm}$  gegeben, der Radialteil gehorcht der Gleichung

$$\left(-\frac{1}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2} + v(r)\right) R_{nl}(r) = E_{nl} R_{nl}(r). \quad (7.8)$$

Die Radialwellenfunktion wird der Randbedingung

$$R_{nl}(\Lambda) \stackrel{!}{=} 0 \quad (7.9)$$

unterworfen, wobei  $\Lambda$  sehr viel größer als  $\lambda$  ist. Diese Randbedingung führt zu einer Diskretisierung der Energieeigenwerte und erlaubt durch die diskrete Quantenzahl  $n$  eine eindeutige Zuordnung zwischen den exakten Eigenzuständen mit Wechselwirkung und den freien Lösungen. Es wird sich im Laufe der Herleitung zeigen, daß der Wert von  $\Lambda$  oder die Annahme einer sphärischen Oberfläche nicht von Belang sind.

Zuerst wird die freie Lösung  $v(r) \equiv 0$  der Radialgleichung (7.8) betrachtet, sie ist allgemein durch die sphärischen Besselfunktionen  $j_l(x)$  zum Drehimpuls  $l$  gegeben

$$R_{nl}(r) = A_{nl} j_l(q_{nl} r). \quad (7.10)$$

Die Randbedingung (7.9)

$$j_l(q_{nl} \Lambda) = j_l(\xi_{nl}) \stackrel{!}{=} 0 \quad \Rightarrow \quad q_{nl} = \xi_{nl}/\Lambda \quad (7.11)$$

führt zu einer Diskretisierung der Relativimpulse  $q_{nl}$ . Hier bezeichnet  $\xi_{nl}$  die  $n$ -te Nullstelle der sphärischen Besselfunktion  $j_l(x)$ . Die quantisierten Impulse im wechselwirkungsfreien Fall sind also gegebene Konstanten, die proportional  $1/\Lambda$  skalieren. Die quantisierten Energieeigenwerte ergeben sich aus den Impulsen durch

$$E_{nl} = \frac{1}{2\mu} q_{nl}^2 = \frac{1}{2\mu\Lambda^2} \xi_{nl}^2. \quad (7.12)$$

Der Normierungsfaktor  $A_{nl}$  in (7.10) kann mit Hilfe der Randbedingung aus dem Normintegral berechnet werden

$$A_{nl}^{-2} = \int_0^\Lambda dr \, r^2 j_l^2(q_{nl} r) = q_{nl}^{-3} \int_0^{\xi_{nl}} dx \, x^2 j_l^2(x) \quad (7.13)$$

mit der Substitutionsvariablen  $x = q_{nl}r$ . Das Integral über das Quadrat der Besselfunktion bis zur Nullstelle kann analytisch ausgewertet werden, für das inverse Quadrat des Normierungsfaktor verbleibt

$$A_{nl}^{-2} = -\frac{\Lambda^3}{2} j_{l-1}(\xi_{nl}) j_{l+1}(\xi_{nl}) = \frac{\Lambda^3}{2} j_{l+1}^2(\xi_{nl}). \quad (7.14)$$

Im letzten Schritt wurde von den Additionstheoremen für die Besselfunktionen Gebrauch gemacht. Unter der Annahme  $\xi_{nl} \gg 1$ , deren Bedeutung und Gültigkeit später ausführlich diskutiert wird, kann man sich der asymptotischen Entwicklung der Bessel- bzw. Neumannfunktionen bedienen

$$j_l(x) \stackrel{x \gg 1}{\approx} \frac{1}{x} \sin\left(x - \frac{\pi l}{2}\right), \quad n_l(x) \stackrel{x \gg 1}{\approx} -\frac{1}{x} \cos\left(x - \frac{\pi l}{2}\right). \quad (7.15)$$

Unter Berücksichtigung der asymptotischen Form  $\xi_{nl} = \pi(n + l/2)$  der Nullstellen der Besselfunktionen vereinfacht sich der Normierungsfaktor auf

$$A_{nl}^{-2} = \frac{\Lambda^3}{2 \xi_{nl}^2} = \frac{\Lambda}{2 q_{nl}^2} \quad \text{für } \xi_{nl} \gg 1. \quad (7.16)$$

Man beachte, daß die asymptotische Entwicklung (7.15) für  $l = 0$  die exakte Besselfunktion reproduziert, dementsprechend ist der Ausdruck für den Normierungsfaktor hier ebenfalls exakt. Nur für  $l > 0$  stellt er eine Näherung dar.

In Gegenwart einer Wechselwirkung  $v(r)$  mit Reichweite  $\lambda$  ist die Lösung der Radialgleichung (7.8) außerhalb der Potentialreichweite gegeben durch

$$\bar{R}_{nl}(r) = \bar{A}_{nl} [j_l(\bar{q}_{nl} r) - \tan \eta_l(\bar{q}_{nl}) n_l(\bar{q}_{nl} r)] \quad \text{für } r > \lambda, \quad (7.17)$$

wobei  $\eta_l(q)$  die impulsabhängige Streuphase der  $l$ . Partialwelle bezeichnet. Die Balken unterscheiden die Größen in Gegenwart der Wechselwirkung von den Größen im wechselwirkungsfreien Fall. Wiederum führt die Randbedingung (7.9) zu einer Diskretisierung der Impulse  $\bar{q}_{nl}$  und der damit verknüpften Energien

$$\bar{E}_{nl} = \frac{1}{2\mu} \bar{q}_{nl}^2. \quad (7.18)$$

Die Wechselwirkung bewirkt eine Verschiebung der Energien  $\bar{E}_{nl}$  gegenüber den freien Energien  $E_{nl}$ . Dabei wird die Identifikation zusammengehöriger Niveaupaares durch Abzählen der Zustände positiver Energie erreicht, die etwaigen gebundenen Zustände werden nicht berücksichtigt. Die Quantenzahl  $n$  ist im Falle des wechselwirkenden Systems also als Nummer des Zustandes in dem auf positive Energien eingeschränkten Spektrum zu verstehen.

Durch Auswerten der Randbedingung  $\bar{R}_{nl}(\Lambda) = 0$  ergibt sich eine Bestimmungsgleichung für die quantisierten Impulse  $\bar{q}_{nl}$  im wechselwirkenden Fall

$$j_l(\bar{q}_{nl}\Lambda) = \tan \eta_l(\bar{q}_{nl}) n_l(\bar{q}_{nl}\Lambda). \quad (7.19)$$

Durch Einsetzen der asymptotischen Entwicklungen (7.15) läßt sich dieser Ausdruck auf die Form

$$-\tan\left(\bar{q}_{nl}\Lambda - \frac{\pi l}{2}\right) = \tan \eta_l(\bar{q}_{nl}) \quad \text{für } \bar{q}_{nl}\Lambda \gg 1 \quad (7.20)$$



reduzieren. Wiederum gilt diese Relation im Falle  $l = 0$  exakt, nur für  $l > 0$  handelt es sich um eine Näherung. Die Gleichheit der beiden Seiten ist gewährleistet, wenn die Argumente bis auf ganzzahlige Vielfache von  $\pi$  gleich sind

$$\bar{q}_{nl}\Lambda = -\eta_l(\bar{q}_{nl}) + \pi(\nu + \frac{l}{2}) \quad \text{für } \nu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (7.21)$$

Aus dem physikalischen Kontext ergibt sich eine spezielle Wahl von  $\nu$ : Da im wechselwirkenden Fall nur die Zustände positiver Energie gezählt werden sollen, muß die Streuphase um den Beitrag der gebundenen Zustände entsprechend des Levinson-Theorems bereinigt werden, d.h. von der Streuphase ist in Abhängigkeit von der Zahl  $n_b$  der gebundenen Zustände der Beitrag  $\pi n_b$  abzuziehen. Darüber hinaus muß  $\bar{q}_{nl}$  in den zugeordneten freien Impuls  $q_{nl}$  übergehen, wenn die bereinigte Streuphase gegen Null geht. Wie man sich leicht überzeugt, werden diese beiden Forderungen mit der Wahl  $\nu = n + n_b$  erfüllt. Für die Impulsverschiebung  $\Delta q_{nl} := \bar{q}_{nl} - q_{nl}$  läßt sich nun folgende Beziehung formulieren

$$\Delta q_{nl} = \bar{q}_{nl} - q_{nl} = -\frac{1}{\Lambda} [\eta_l(\bar{q}_{nl}) - \pi n_b] = -\frac{1}{\Lambda} \hat{\eta}_l(\bar{q}_{nl}). \quad (7.22)$$

Hier und im folgenden bezeichnet  $\hat{\eta}_l(q_{nl}) = \eta_l(q_{nl}) - \pi n_b$  die um den Beitrag der gebundenen Zustände bereinigte Streuphase. Sie läßt sich in der Impulsverschiebung  $\Delta q_{nl}$  gegenüber dem freien Impuls  $q_{nl}$  entwickeln

$$\hat{\eta}_l(\bar{q}_{nl}) = \hat{\eta}_l(q_{nl}) + \hat{\eta}'_l(q_{nl})\Delta q_{nl} + \dots \quad (7.23)$$

Der lineare Term kann gegenüber dem von der Impulsverschiebung unabhängigen Summanden vernachlässigt werden, da  $\Delta q_{nl}$  entsprechend Gleichung (7.22) von der Ordnung  $1/\Lambda$  ist und  $\Lambda$  beliebig groß gewählt werden kann. Zwischen der Impulsverschiebung und der Streuphase ergibt sich somit die einfache Beziehung

$$\Delta q_{nl}\Lambda = -\hat{\eta}_l(q_{nl}) \quad \text{bzw.} \quad \frac{\Delta q_{nl}}{q_{nl}} = -\frac{1}{\xi_{nl}} \hat{\eta}_l(q_{nl}). \quad (7.24)$$

Die relative Impulsverschiebung läßt sich direkt auf eine Energieverschiebung umrechnen. Aus dem allgemeinen Zusammenhang

$$\frac{\Delta E_{nl}}{E_{nl}} = \frac{\bar{q}_{nl}^2 - q_{nl}^2}{q_{nl}^2} = 2\frac{\Delta q_{nl}}{q_{nl}} + \left(\frac{\Delta q_{nl}}{q_{nl}}\right)^2. \quad (7.25)$$

ergibt sich unter der Annahme, daß die Impulsverschiebung von der Ordnung  $1/\Lambda$  ist, so daß der quadratische Term vernachlässigt werden kann, für die relative Energieverschiebung

$$\frac{\Delta E_{nl}}{E_{nl}} = -\frac{2}{\xi_{nl}} \hat{\eta}_l(q_{nl}). \quad (7.26)$$

Eine entsprechende Beziehung zwischen Energie und Streuphase ist in der Literatur bekannt [Gott66]. In der dort beschriebenen Form wird die Energieverschiebung allerdings relativ zum freien Zustand mit gleicher Knotenzahl bestimmt, damit erübrigt sich die Subtraktion der gebundenen Zustände in der Streuphase. Für die folgende Formulierung der Kontaktwechselwirkung wird jedoch die hier verwendete Definition der Energieverschiebung benötigt.

### 7.2.2 Parametrisierung der Kontaktwechselwirkung

Im zweiten Schritt ist eine Kontaktwechselwirkung zu konstruieren, deren Erwartungswert in den freien Zuständen  $|nlm\rangle$  der Energieverschiebung aufgrund der vollen Wechselwirkung entspricht

$$\langle nlm | \mathbf{v}^{\text{eff}} | nlm \rangle \stackrel{!}{=} \Delta E_{nl}. \quad (7.27)$$

Gesucht wird eine geschlossene Darstellung dieser effektiven Wechselwirkung  $\mathbf{v}^{\text{eff}}$ . Hierbei werden die üblichen Symmetrieforderungen gestellt, Translations-, Rotations- und Galileiinvarianz sowie Symmetrie gegen Teilchenvertauschung, Zeit- und Paritätsumkehr. Darüber hinaus soll die Wechselwirkung durch einen hermiteschen Operator beschrieben werden, der in Ortsdarstellung diagonal ist  $v^{\text{eff}}(r) = \langle \vec{r} | \mathbf{v}^{\text{eff}} | \vec{r} \rangle$ , alle außerdiagonalen Matrixelemente müssen verschwinden. Schließlich soll es sich um eine Kontaktwechselwirkung handeln, so daß das Potential für alle  $r \neq 0$  verschwindet.

Entsprechend der Drehimpulsstruktur der Energieverschiebungen liegt es nahe, das Potential in einer Partialwellenzerlegung darzustellen

$$\mathbf{v}^{\text{eff}} = \sum_{l=0}^{\infty} \mathbf{\Pi}_l \mathbf{v}_l^{\text{eff}} \mathbf{\Pi}_l, \quad (7.28)$$

dabei bezeichnet  $\mathbf{\Pi}_l$  den Projektor auf den Unterraum zum Drehimpuls  $l$ . Für die den einzelnen Partialwellen zugeordneten Operatoren  $\mathbf{v}_l^{\text{eff}}$  ist nun ein Ansatz zu konstruieren, der den obigen Forderungen genügt. Die Forderung einer Kontaktwechselwirkung erzwingt das Auftreten von Impulsabhängigkeiten, d.h. Nichtlokalitäten, da sonst der unterschiedlichen Struktur der Energieverschiebung in den einzelnen Partialwellen nicht Rechnung getragen werden kann. Die einfachste systematische Wahl für das effektive Kontaktpotential der  $l$ -ten Partialwelle ist

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_l^{\text{eff}} &= \mathbf{q}_r^{\dagger l} g_l \delta^3(\mathbf{r}) \mathbf{q}_r^l \\ &= \int d^3r |\vec{r}\rangle \overleftrightarrow{\frac{\partial^l}{\partial r^l}} g_l \delta^{(3)}(r) \overleftrightarrow{\frac{\partial^l}{\partial r^l}} \langle \vec{r}|. \end{aligned} \quad (7.29)$$

Dabei ist  $\delta^{(3)}(r) := \frac{1}{4\pi r^2} \delta(r)$  der Radialteil der dreidimensionalen Deltafunktion in Kugelkoordinaten und  $\mathbf{q}_r := \vec{\mathbf{n}}_r \vec{\mathbf{q}}$  der Radialteil des Relativimpulsoperators.

Die Wechselwirkungsstärken  $g_l$  sind aus der Bedingung (7.27) an die Erwartungswerte zu bestimmen. Die Berechnung der Matrixelemente gestaltet sich wegen der einfachen Struktur der freien Zustände im Zusammenspiel mit der Annahme einer Kontaktwechselwirkung recht simpel. In Ortsdarstellung gilt für einen freien Drehimpulseigenzustand

$$\langle \vec{r} | nlm \rangle = R_{nl}(r) Y_{lm}(\Omega), \quad R_{nl}(r) = A_{nl} j_l(q_{nl}r) \quad (7.30)$$

mit der Normierungskonstanten  $A_{nl}$  nach (7.14) und dem quantisierten Relativimpuls  $q_{nl}$  nach (7.11). Da die Kontaktwechselwirkung nur Beiträge im Ursprung liefert, kann die Besselfunktion um  $x = 0$  entwickelt werden. Das führt auf folgende Darstellung der Radialwellenfunktion in der Umgebung des Ursprungs:

$$R_{nl}(r) \stackrel{q_{nl}r \ll 1}{=} A_{nl} \frac{(q_{nl}r)^l}{(2l+1)!!} \left[ 1 - \frac{(q_{nl}r)^2}{2(2l+3)} + \dots \right]. \quad (7.31)$$

Die direkte Rechnung für das zur Auswertung der Bedingung (7.27) benötigte diagonale Matricelement ergibt damit

$$\begin{aligned}
 \langle nlm | \mathbf{v}_l^{\text{eff}} | nlm \rangle &= g_l \int d^3r Y_{lm}^*(\Omega) R_{nl}^*(r) \overleftarrow{\frac{\partial^l}{\partial r^l}} \delta^{(3)}(r) \overrightarrow{\frac{\partial^l}{\partial r^l}} R_{nl}(r) Y_{lm}(\Omega) \\
 &= \frac{g_l}{4\pi} \int dr \delta(r) \left| \frac{\partial^l}{\partial r^l} R_{nl}(r) \right|^2 \int d\Omega |Y_{lm}(\Omega)|^2 \\
 &= \frac{g_l}{4\pi} \left| \frac{\partial^l}{\partial r^l} R_{nl}(r) \right|_{r=0}^2 \\
 &= \frac{g_l}{4\pi} \left[ \frac{l!}{(2l+1)!!} \right]^2 A_{nl}^2 q_{nl}^{2l}.
 \end{aligned} \tag{7.32}$$

Durch eine entsprechende Rechnung lassen sich die Eigenschaften der Außerdiagonalelemente bestimmen. Die enthaltene Integration über die Kugelflächenfunktionen bedingt

$$\langle nl'm' | \mathbf{v}_l^{\text{eff}} | nlm \rangle \propto \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}. \tag{7.33}$$

Da das Matricelement proportional zur  $l$ -ten Ableitung der Radialwellenfunktion im Ursprung ist, ergibt sich aus (7.31) sofort

$$\langle nl'm' | \mathbf{v}_l^{\text{eff}} | nl'm' \rangle \neq 0 \quad \text{nur für } l' = l, l+2, l+4, \dots \tag{7.34}$$

Diese Eigenschaft erweist sich im folgenden als sehr nützlich. Wie man sieht, haben die Operatoren  $\mathbf{v}_l^{\text{eff}}$  zu  $l = 0$  bzw.  $l = 1$  nichtverschwindende Matricelemente nur für Zustände mit gleichem  $l$ . Sie enthalten also bereits eine Projektion auf die entsprechende Partialwelle, so daß die explizite Anwendung der Projektionsoperatoren  $\mathbf{\Pi}_l$  nicht erforderlich ist. Diese Eigenschaft gilt allerdings nur für die beiden niedrigsten Partialwellen. So hat z.B. der Operator  $\mathbf{v}_2^{\text{eff}}$  nichtverschwindende Matricelemente für Zustände mit  $l = 2$  und  $l = 0$ , so daß eine explizite Projektion auf  $l = 2$  notwendig ist.

Gleichsetzen des Diagonalelements (7.32) mit der Energieverschiebung nach (7.26) und Einsetzen der Normierungskonstanten (7.14) führt auf eine Gleichung für die Wechselwirkungsstärke  $g_l$

$$g_l = 4\pi \left[ \frac{(2l+1)!!}{l!} \right]^2 A_{nl}^{-2} \frac{\Delta E_{nl}}{q_{nl}^{2l}} = -\frac{4\pi}{2\mu} \left[ \frac{(2l+1)!!}{l!} \right]^2 \frac{\hat{\eta}_l(q_{nl})}{q_{nl}^{2l+1}}. \tag{7.35}$$

Offensichtlich hängt der letzte Term nicht explizit von der aus technischen Gründen eingeführten Nebenbedingung (7.9) und der damit verbundenen Länge  $\Lambda$  ab. Sie macht sich lediglich implizit durch die quantisierten freien Impulse  $q_{nl}$  bemerkbar. Durch eine geringfügige Variation des Quantisierungsradius  $\Lambda$  können beliebige Werte von  $q_{nl}$  realisiert werden, ohne daß sich die analytische Form der Wechselwirkungsstärke ändert. Die obige Form kann somit direkt auf kontinuierliche Impulsvariablen verallgemeinert werden

$$g_l = -\frac{4\pi}{2\mu} \left[ \frac{(2l+1)!!}{l!} \right]^2 \frac{\hat{\eta}_l(q)}{q^{2l+1}}. \tag{7.36}$$

Diese Wechselwirkungsstärken, zusammen mit dem Ansatz (7.29), definieren die allgemeinste Form der *effektiven hermiteschen Kontaktwechselwirkung*.

Abschließend kann der Ausdruck für die Wechselwirkungsstärke noch weiter vereinfacht werden, indem man sich die Parametrisierung der Streuphasen durch die Streulänge  $a_l$  der entsprechenden Partialwelle zunutze macht. Unter der Annahmen kleiner Impulse, genauer  $q a_l \ll 1$  gilt für die Streuphase in niedrigster Ordnung im Impuls

$$\frac{\hat{\eta}_l(q)}{q^{2l+1}} \approx \frac{\tan \eta_l(q)}{q^{2l+1}} \approx -\frac{(2l+1)}{[(2l+1)!!]^2} a_l^{2l+1} \quad \text{für } q a_l \ll 1. \quad (7.37)$$

Die linke Seite entspricht gerade der Kombination von Streuphase und Impuls, wie sie in den Wechselwirkungsstärken (7.36) auftritt, so daß durch Einsetzen

$$g_l = \frac{4\pi}{2\mu} \frac{(2l+1)}{(l!)^2} a_l^{2l+1} \quad (7.38)$$

folgt. Die Wechselwirkungsstärke der  $l$ -ten Partialwelle ist proportional zur entsprechenden Streulänge in der  $(2l+1)$ -ten Potenz und unabhängig vom Impuls. Zusammen mit (7.29) definiert sie die *Streulängenformulierung der effektiven Kontaktwechselwirkung*.

### 7.2.3 Annahmen und Gültigkeit

Zusammenfassend sollen die Annahmen und Näherungen, die zur Ableitung der effektiven Kontaktwechselwirkung gemacht wurden, aufgelistet werden. Dazu wird zunächst die Formulierung der Wechselwirkungsstärken in den Streuphasen (7.36) zugrundegelegt.

Für den  $l = 0$ - oder s-Wellenanteil der effektiven Kontaktwechselwirkung sind zwei Näherungen nötig. Erstens, die Entwicklung (7.23) der Streuphase um den wechselwirkungsfreien Impuls, wobei alle Terme jenseits des konstanten Glieds vernachlässigt werden. Diese Näherung gilt unter der Annahme, daß die Änderung der Streuphase im Intervall  $\Delta q_{nl}$  klein gegen deren Absolutwert ist

$$|\hat{\eta}_l(q_{nl})| \gg |\eta'_l(q_{nl}) \Delta q_{nl}| \quad (7.39)$$

Diese Annahme ist ausgezeichnet erfüllt, da die Impulsverschiebung von der Ordnung  $1/\Lambda$  ist, solange das Potential nicht einen sehr schwach gebundenen oder einen knapp ungebundenen Zustand aufweist. In diesem Fall kann die Ableitung der Streuphase bei kleinen Impulsen große Werte annehmen, so daß die Annahme für die niedrigsten Zustände des Zweiteilchenspektrums nicht erfüllt ist. Nichtsdestoweniger gilt die Annahme für die energetisch höheren Zustände selbst in diesem Fall.

Die zweite Näherung betrifft die Berechnung der relativen Energieverschiebung aus der relativen Impulsverschiebung (7.25), wobei der quadratische Term vernachlässigt wird. Dies setzt voraus, daß die relative Impulsverschiebung klein ist

$$\left| \frac{\Delta q_{nl}}{q_{nl}} \right| \ll 1. \quad (7.40)$$

Wie anhand der Gleichung (7.24) zu erkennen ist, nimmt die relative Energieverschiebung für die niedrigsten Zustände des Spektrums nur dann große Werte an, wenn die Streuphase bei kleinen Impulsen sehr stark anwächst oder abfällt. Damit gibt dieselbe Einschränkung wie im vorangehenden Fall: Mit Ausnahme der niedrigsten Zustände des Spektrums für ein Potential, das einen knapp bzw. beinahe gebundenen Zustand aufweist, ist die Annahme sehr gut erfüllt.

Für höhere Partialwellen ( $l > 0$ ) wird eine weitere Näherung verwendet: Die asymptotische Entwicklung der Bessel- und Neumannfunktionen (7.15), die bei der Auswertung der Randbedingung (7.20) und bei der Bestimmung der Normierungsfaktors (7.14) eine Rolle spielt. Formal gilt sie unter der Bedingung

$$\xi_{nl} = q_{nl}\Lambda \gg 1. \quad (7.41)$$

In Praxi läßt sich die Qualität der asymptotischen Entwicklung durch direkten Vergleich mit den exakten Größen quantifizieren. Hier zeigt sich, daß z.B. die Näherung für die Normierungskonstante (7.16) oberhalb des ersten angeregten Zustandes ( $n = 2$ ) um weniger als 1% von der exakten Norm abweicht. Wie in den beiden vorangehenden Fällen liefert die Näherung also mit Ausnahme der niedrigsten Zustände hervorragende Ergebnisse. In Bezug auf die Anwendung in einem fermionischen Vielteilchensystem, in dem die niedrigsten Impulszustände mit relativ geringem Gewicht gegenüber den Impulsen nahe der Fermikante eingehen, sind diese Abweichungen vollkommen vernachlässigbar.

Die einzige „wirkliche Näherung“ besteht in der Parametrisierung (7.37) der Streuphase durch die Streulänge  $a_l$ , die schließlich auf die impulsunabhängigen Wechselwirkungsstärken (7.38) führt. Diese Parametrisierung ist nur unter der Annahme

$$q a_l \ll 1 \quad (7.42)$$

gültig. Typischerweise weicht die Streulängenparametrisierung für  $q a_l \approx 1$  um 20% von der Streuphase ab. Für spezielle Wechselwirkungen kann die Abweichung jedoch auch größer sein. Ob diese Abweichungen für die Beschreibung des Vielteilchensystems problematisch sind, wird in Abschnitt 7.3.5 konkret diskutiert. Hier ist zu bedenken, daß die Streulängenformulierung kein zwingender Bestandteil der effektiven Kontaktwechselwirkung ist. Sie erleichtert die Anwendung lediglich, insofern sie auf impulsunabhängige Kopplungsstärken führt. Die Parametrisierung der Streuphasen kann ohne weiteres um einen impulsabhängigen Effektive-Reichweite-Term erweitert oder gänzlich anders dargestellt werden, wenn die konkrete Anwendung es erfordert.

### 7.2.4 Ein anderer Zugang: Pseudopotential

Alle bisherigen Untersuchungen zu ultrakalten atomaren Gasen, die auf eine effektive Wechselwirkung zurückgreifen, stützen sich auf das sog. *Pseudopotential*, das bereits 1936 von E. Fermi vorgeschlagen wurde und Einzug in Lehrbücher zur theoretischen Kernphysik fand [BIWe79]. Das Konzept beruht darauf, die Wirkung des ursprünglichen Potentials auf eine Relativwellenfunktion als eine *Randbedingung bei  $r = 0$*  zu formulieren. Sie ist so zu wählen, daß die Lösung der freien Schrödingergleichung unter Einbeziehung der Randbedingung auf eine Wellenfunktion führt, die außerhalb der Potentialreichweite mit der exakten Wellenfunktion übereinstimmt. Die Randbedingung kann dann formal als Kontaktwechselwirkung — das Pseudopotential — umgeschrieben werden, die per constructionem durch die gleichen Streuphasen wie das ursprüngliche Potential gekennzeichnet ist. In der ursprünglichen Formulierung beschränkt sich das Pseudopotential auf den s-Wellenkanal, es wurde jedoch von K. Huang und C.N. Yang auf alle Partialwellen erweitert [Huan63, HuYa57].

Im Anhang B.1 wird das Pseudopotential für alle Partialwellen explizit hergeleitet, hier soll lediglich das Endergebnis mit der effektiven Kontaktwechselwirkung verglichen

werden. Entsprechend (B.19) und (B.17) gilt für die allgemeinste Form des Pseudopotentials der  $l$ -ten Partialwelle

$$\mathbf{v}_l^{\text{ps}} = \int d^3r |\vec{r}\rangle \gamma_l \frac{\delta^{(3)}(r)}{r^l} \frac{\partial^{2l+1}}{\partial r^{2l+1}} r^{l+1} \langle \vec{r}| \quad (7.43)$$

mit den Wechselwirkungsstärken

$$\gamma_l = -\frac{4\pi}{2\mu} \frac{(l+1)(2l-1)!!(2l+1)!!}{(2l+1)!} \frac{\tan \eta_l(q)}{q^{2l+1}}. \quad (7.44)$$

Für  $l = 0$  reduziert sich das Pseudopotential auf einen lokalen hermiteschen Operator, der in Streulängenformulierung mit dem s-Wellenterm der effektiven Kontaktwechselwirkung identisch ist. Für höhere Partialwellen ( $l > 0$ ) wird das Pseudopotential durch einen *nicht-hermiteschen* Operator beschrieben, was eine Interpretation als effektive Wechselwirkung erschwert. Die nicht-hermitesche Struktur ist eine direkte Folge der Konstruktion über die Umformulierung einer Randbedingung an die Wellenfunktion.

Um die Wirkung des Pseudopotentials mit der effektiven Kontaktwechselwirkung zu vergleichen, wird der Erwartungswert des Pseudopotentials in freien Zweiteilchenzuständen (7.30) bestimmt. Er beschreibt gerade die vom Pseudopotential induzierte Energieverschiebung. Die Rechnung erfolgt analog zu (7.32) und führt auf

$$\Delta E_{nl}^{\text{ps}} = \langle nlm | \mathbf{v}_l^{\text{ps}} | nlm \rangle = -\frac{2E_{nl}}{\xi_{nl}} \frac{(l+1)}{(2l+1)} \tan \eta_l(q_{nl}), \quad (7.45)$$

wobei für die Normierungskonstante der freien Lösung die Form (7.14) eingesetzt wurde. Im Vergleich zur Energieverschiebung (7.26) des vollen Potentials, die per Constructionem mit der Energieverschiebung der effektiven Kontaktwechselwirkung übereinstimmt, tritt der Tangens der Streuphase und ein zusätzlicher drehimpulsabhängiger Faktor auf. Für kleine  $qa_l$  stimmen die Streuphase und ihr Tangens gut überein, so daß dieser Unterschied nicht wesentlich ist. Der Drehimpulsfaktor  $\frac{(l+1)}{(2l+1)}$  ist hingegen wesentlich und führt dazu, daß die *Energieverschiebung, berechnet mit dem Pseudopotential, jenseits der s-Welle stark von der Energieverschiebung der vollen Wechselwirkung abweicht*. Für die p-Wellenkomponente z.B. liefert das Pseudopotentials eine um 2/3 kleinere Energieverschiebung als die volle Wechselwirkung, d.h. der Einfluß der Wechselwirkung wird deutlich unterschätzt.

Daraus muß gefolgert werden, daß das Pseudopotential keine geeignete effektive Wechselwirkung für die Beschreibung der Eigenschaften eines Vielteilchensystem in einer Mean-Field-Rechnung ist. Für den s-Wellenteil ergibt sich zwar die richtige Energieverschiebung, da jedoch alle höheren Partialwellen systematisch falsch sind, muß das Konzept des Pseudopotentials in Frage gestellt werden. Die effektive Kontaktwechselwirkung, wie sie in dieser Arbeit abgeleitet wurde, muß für eine konsistente Mean-Field-Beschreibung ultrakalter atomarer Gase jenseits der s-Welle das Mittel der Wahl sein.

### 7.3 Ein illustratives Beispiel

Um die Ableitung der effektiven Kontaktwechselwirkung zu illustrieren, wird an dieser Stelle das einfache analytische Beispiel eines anziehenden Kastenpotentials diskutiert. Es bietet die Möglichkeit die Qualität der effektiven Kontaktwechselwirkung durch Vergleich mit den exakten Energiespektren quantitativ zu untersuchen.

### 7.3.1 Kastenpotential mit Randbedingung

Gegeben ist ein System zweier Teilchen, die mittels eines sphärisch symmetrischen, anziehenden Kastenpotentials mit Radius  $\lambda$  und Potentialtiefe  $V_0 > 0$  wechselwirken. Nach Separation der Zweiteilchenwellenfunktion in Relativ- und Schwerpunktsanteil sowie Separation der Relativwellenfunktion in Radial- und Winkelteil verbleibt für die Radialwellenfunktion die Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{l(l+1)}{r^2}\right) R_l(r) = \begin{cases} Q^2 R_l(r) & \text{für } r < \lambda \\ q^2 R_l(r) & \text{für } r \geq \lambda \end{cases} \quad (7.46)$$

$$\text{mit } Q = \sqrt{q^2 + 2\mu V_0}.$$

Die allgemeine Lösung dieses sphärischen Problems mit stückweise konstantem Potential ist durch eine Superposition von sphärischen Bessel- und Neumannfunktionen gegeben:

$$R_l(r) = \begin{cases} c_1 j_l(Qr) + c_2 n_l(Qr) & \text{für } r < \lambda \\ d_1 j_l(qr) + d_2 n_l(qr) & \text{für } r \geq \lambda \end{cases}. \quad (7.47)$$

Da die Wellenfunktion im Ursprung regulär sein muß, gilt  $c_2 \equiv 0$ . Die übrigen drei Konstanten werden durch die Anschlußbedingung für die Wellenfunktion und deren Ableitung im Punkt  $r = \lambda$  sowie die Normierung festgelegt. Darüber hinaus wird im Punkt  $\Lambda$  die Randbedingung

$$R_l(\Lambda) = 0 \quad (7.48)$$

auferlegt, die zu einer Diskretisierung der Impulse  $q$  und der damit verknüpften Energieeigenwerte  $E = \frac{1}{2\mu} q^2$  führt. Das Problem ist damit exakt gelöst, die Konstanten  $c_1, d_1$  und  $d_2$  können analytisch als Funktion der Potentialtiefe, des Potentialradius und des Impulses angegeben werden. Die aus der Randbedingung (7.48) resultierenden Impulseigenwerte sind numerisch zu bestimmen. Es erweist sich als zweckmäßig, alle Längen in Einheiten der Systemgröße  $\Lambda$  und Energien in Einheiten von  $(2\mu\Lambda^2)^{-1}$  anzugeben. Um die Ausdrücke nicht unnötig zu überladen, wird die Masse  $m = 2\mu$  für dieses Beispiel auf 1 gesetzt, so daß als endgültige Energieeinheit  $\Lambda^{-2}$  bleibt. Für die angestrebte Anwendung ist besonders der Fall  $\Lambda \gg \lambda$  von Interesse, d.h. die Reichweite der Wechselwirkung ist klein gegen die Gesamtdimension des Systems.

### 7.3.2 Energiespektrum und Energieverschiebung

Im folgenden werden die Energieeigenwerte der s-Wellenzustände in Abhängigkeit von der Potentialstärke  $\lambda\sqrt{V_0}$  bei festem Potentialradius  $\lambda = 0.01\Lambda$  betrachtet. Die Abbildung 7.1(a) stellt das Energiespektrum der niedrigsten Eigenzustände als Funktion der Potentialstärke dar. Es zeigt sich ein sehr charakteristisches Verhalten: Beginnend beim wechselwirkungsfreien Fall  $\lambda\sqrt{V_0} = 0$  sinkt die Energie der Eigenzustände mit wachsender Potentialstärke sehr langsam, bis das Potential nahezu die Stärke erreicht hat, einen gebundenen Zustand zu bilden. Sodann fällt die Energie des niedrigsten ungebundenen Zustandes rapide ab und bildet einen gebundenen Zustand, gleichzeitig rücken alle angeregten Zustände um praktisch ein Energieniveau nach unten. Die starke



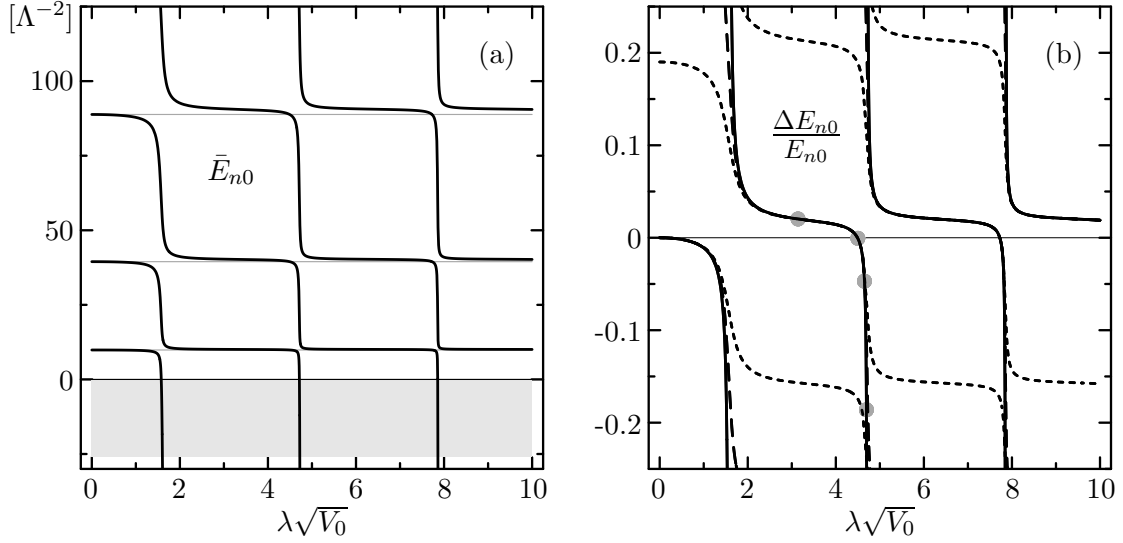


Abbildung 7.1 · Energien der niedrigsten s-Wellenzustände für das Beispielsystem als Funktion der Potentialstärke gegeben durch  $\lambda\sqrt{V_0}$ . (a) Energie der niedrigsten Eigenzustände. (b) Relative Energieverschiebung  $\Delta E_{n0}/E_{n0}$  des Grundzustandes (—), des 5. angeregten (---) und des 10. angeregten Zustandes (·····) im auf positive Energien eingeschränkten Spektrum.

Veränderung der Energie mit der Potentialstärke ist charakteristisch für die Gegenwart einer Resonanz, d.h. eines knapp gebundenen bzw. ungebundenen Zweiteilchenzustandes. Dieses Verhalten wiederholt sich immer, wenn das Potential stark genug geworden ist, um einen weiteren gebundenen Zustand zu beherbergen. Die Resonanz liegt bei Potentialstärken in der Umgebung von  $\lambda\sqrt{V_0} = \pi(\nu - \frac{1}{2})$  wobei  $\nu$  die Zahl der nichttrivialen Knoten, d.h. die Knoten außer den notwendigen bei  $r = 0$  und  $r = \Lambda$ , bzw. die Zahl der gebundenen Zustände angibt. Abseits der resonanten Potentialstärken bilden die Energieniveaus nahezu konstante Plateaus aus.

Im Bereich der Plateaus liegen die Energien  $\bar{E}_{n0}$  der Niveaus stets sehr nahe an einem der wechselwirkungsfreien Energieeigenwerte  $E_{n0}$ . Der Index  $n$  bezeichnet hier die Nummer des Niveaus im auf positive Energien eingeschränkten Spektrum, die „0“ deutet an, daß es sich um s-Wellenzustände handelt. Aufgrund dieses Verhaltens ist die Energieverschiebung  $\Delta E_{n0} = \bar{E}_{n0} - E_{n0}$  des  $n$ -ten wechselwirkenden Niveaus gegenüber dem  $n$ -ten freien Niveau eine charakteristische Größe. In Abbildung 7.1(b) ist die relative Energieverschiebung  $\Delta E_{n0}/E_{n0}$  als Funktion der Wechselwirkungsstärke für den Grundzustand, den 5. und den 10. angeregten Zustand des auf positive Energien eingeschränkten Spektrums dargestellt. Offenbar ist sie im Bereich der Plateaus unabhängig von der Absolutenergie des Niveaus und beträgt etwa 2%.

Am Rande der Plateaus, d.h. für Wechselwirkungsstärken, die eine knapp bzw. beinahe gebundenen Zustand erlauben, treten wesentlich größere Energieverschiebungen auf. In diesem Bereich ist die relative Energieverschiebung darüber hinaus von der Absolutenergie des Niveaus abhängig. Mit wachsender Absolutenergie sinkt der relative Abstand zu den benachbarten Niveaus des Spektrums, in führender Ordnung fällt er mit  $1/\sqrt{E}$  ab. Die Flanken der Plateaus werden daher mit wachsender Absolutenergie zunehmend ausgewaschen, was zu einer Energieabhängigkeit der relativen Energieverschiebung in diesem Bereich führt. Mit wachsender Zahl von gebundenen Zuständen werden die Flanken jedoch schärfer und die Energieabhängigkeit wird reduziert.



### 7.3.3 Wellenfunktionen

Um die Gründe für das charakteristische Verhalten des Spektrums besser zu verstehen, werden einige Wellenfunktionen zu verschiedenen Potentialstärken diskutiert. In Abbildung 7.2 sind die mit  $r$  multiplizierten Radialwellenfunktionen  $R_0(r)$  für den niedrigsten Zustand positiver Energie bei den der Mitte der Plateaus zugeordneten Wechselwirkungsstärken  $\lambda\sqrt{V_0} = \pi\nu$  mit  $\nu = 1, 2, 3, 4$  aufgetragen. Außerhalb der Reichweite  $\lambda$  der Wechselwirkung sind alle Wellenfunktionen identisch. Sie spannen einen Halbsinus mit Nullstellen bei  $\lambda$  und  $\Lambda$  auf, die Wellenlänge beträgt demnach  $2(\Lambda - \lambda)$ . Gegenüber der wechselwirkungsfreien Lösung ist die Wellenlänge damit um den Potentialradius verringert, und die Energie entsprechend erhöht. Für alle Plateauzentren ergibt sich so die gleiche, nur vom Verhältnis von Potentialradius und Systemradius abhängige relative Energieverschiebung

$$\left. \frac{\Delta E_{n0}}{E_{n0}} \right|_{\lambda\sqrt{V_0}=\pi\nu} = \frac{1}{(1 - \lambda/\Lambda)^2} - 1. \quad (7.49)$$

Dies gilt nicht nur für den Grundzustand des Spektrums positiver Energien sondern auch für alle angeregten Zustände. Für  $r < \lambda$  unterscheiden sich die Radialwellenfunktionen der einzelnen Plateaus. Jede beschreibt eine ganze Zahl vollständiger Halbwellen innerhalb der Potentialreichweite, wobei die Zahl der nichttrivialen Knoten durch die Nummer des Niveaus im vollen Spektrum gegeben ist.

Ein weiterer interessanter Punkt ist die Entwicklung der Wellenfunktion mit wachsender Potentialstärke entlang eines Energieniveaus. In Abbildung 7.3 ist dies für einige Wellenfunktionen ausgehend von der Mitte des ersten Plateaus mit  $\lambda\sqrt{V_0} = \pi$  bis in den abfallenden Ast bei  $\lambda\sqrt{V_0} = \frac{3}{2}\pi$  gezeigt. Die zugehörigen Punkte im Energiespektrum sind in Abbildung 7.1(b) markiert. Da in diesem Bereich bereits ein gebundener Zustand existiert, weisen alle Wellenfunktionen einen nichttrivialen Knoten auf. Die Lage dieses Knotens hängt von der Potentialstärke ab: Im Bereich des Plateaus liegt der Knoten bei Radien in der Größenordnung von  $\lambda$  und wandert mit wachsender Potentialstärke zu kleineren Abständen. In der Mitte des Plateaus liegt er genau bei  $\lambda$ .

Am oberen Rand des Plateaus liegt der Knoten innerhalb des Kastenpotentials knapp oberhalb des Punktes  $r \approx \lambda\nu/(\nu + \frac{1}{2})$ . Hier führt eine minimale Erhöhung der Potentialstärke zu einem dramatischen Effekt auf die Wellenfunktion im Außenbereich. Wie in Abbildung 7.3 zu erkennen ist, fällt die Steigung der Wellenfunktion im Punkt  $\lambda$  bei Annäherung an diese Knotenposition rapide ab, im Grenzfall wird die Steigung gerade Null. Aufgrund der Stetigkeitsbedingung muß die Wellenfunktion im Außenbereich ebenfalls diese Steigung besitzen, was unmittelbar zu sehr großen Wellenlängen und niedrigen Energien führt. Gleichzeitig ist die Amplitude der Wellenfunktion im Inneren des Kastenpotentials deutlich erhöht, ein Charakteristikum für das Auftreten einer Zweiteilchenresonanz. Dieser Effekt erklärt die Bildung des Plateaus und den abrupten Abfall der Energie am oberen Rand des Plateaus. Gleichzeitig wird klar, daß die Grenzen des Plateaus mit wachsender Knotenzahl  $\nu$  der Wellenfunktion immer schärfer werden, da die Steigung am Plateaurand immer schneller gegen Null geht.

Erhöht sich die Potentialstärke minimal über den Wert, bei dem die horizontale Tangente auftritt, so wird die Steigung im Anschlußpunkt negativ und die Wellenfunktion muß einen zusätzlichen Knoten im Außenbereich bilden, um die Randbedingungen erfüllen zu können. Damit ist ein weiterer, schwach gebundener Zustand gebildet worden und die Energie des niedrigsten Zustandes positiver Energie erhöht sich entsprechend

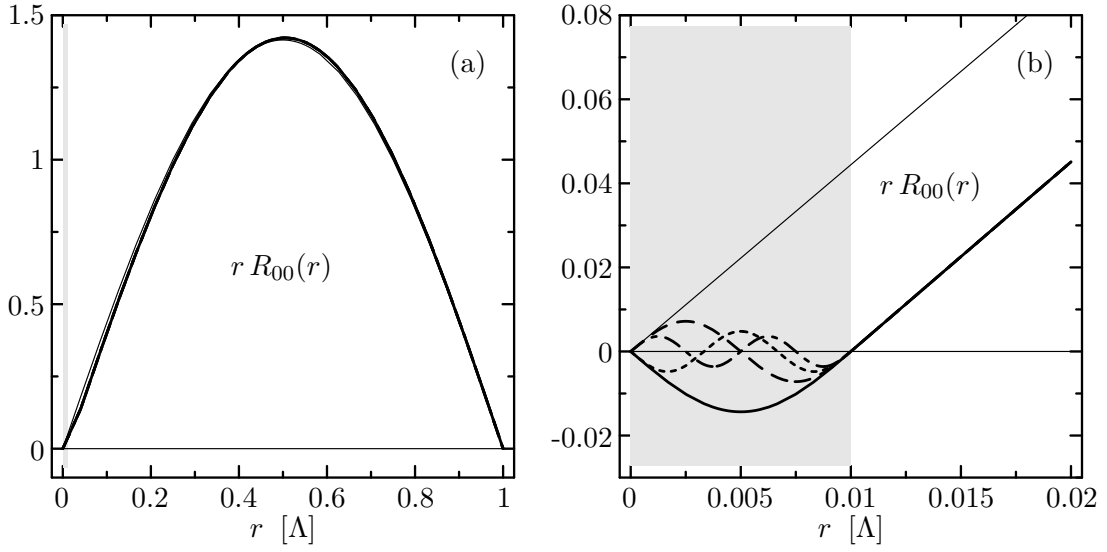


Abbildung 7.2 · Radialwellenfunktionen  $r R_{00}(r)$  des niedrigsten Plateaus des s-Wellenspektrums für die Wechselwirkungsstärken  $\lambda\sqrt{V_0} = \pi\nu$  mit  $\nu = 1, 2, 3, 4$  der Plateaumitten im Vergleich zur wechselwirkungsfreien Lösung (—). Dargestellt ist das Verhalten über den gesamten Radius (a) und ein Ausschnitt über den Bereich der Wechselwirkung (b). Der grau unterlegte Bereich bezeichnet die Ausdehnung des Kastenpotentials.

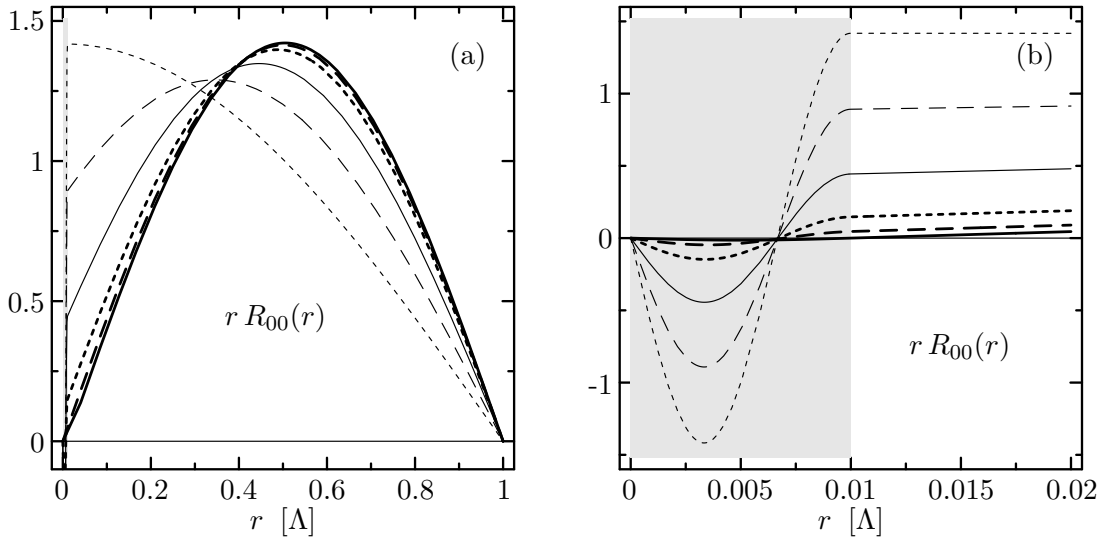


Abbildung 7.3 · Radialwellenfunktionen für den niedrigsten Zustand positiver Energie für verschiedene Wechselwirkungsstärken von der Mitte des ersten Plateaus  $\lambda\sqrt{V_0} = \pi$  bis in den abfallenden Ast bei  $\lambda\sqrt{V_0} = \frac{3}{2}\pi$ . Die drei dicken Linien bezeichnen Zustände, die zum Plateau gezählt werden können, die drei dünnen zeigen Zustände außerhalb des Plateaus. Die zu den drei Plateauzuständen und dem ersten Zustand jenseits des Plateaus gehörigen Punkte im Energiespektrum 7.1(b) sind durch graue Symbole gekennzeichnet. Die Wechselwirkungsstärken  $\lambda\sqrt{V_0}$  sind im einzelnen (—)  $\pi$ , (---) 4.5, (.....) 4.65, (—) 4.695, (---) 4.707 und (-----)  $\frac{3}{2}\pi$ .

der verkürzten Wellenlänge abrupt auf einen Wert in der Nähe des nächsthöheren Zustandes des freien Spektrums. Bei weiterer Erhöhung der Potentialstärke fällt dessen Energie schnell auf den Wert des niedrigsten Zustandes des freien Spektrums ab und bildet das nächste Plateau.

### 7.3.4 Energieverschiebung mit Kontaktwechselwirkung

Die Berechnung der Erwartungswerte des Kontaktpotentials in der Streuphasenformulierung mit wechselwirkungsfreien Zweiteilchenzuständen führt per constructionem auf die Energieverschiebung (7.26). Durch Einsetzen der Parametrisierung (7.37) der Streuphase gelangt man zur Streulängenformulierung der Energieverschiebung. Für s- bzw. p-Wellenzustände ergibt sich explizit

$$\frac{\Delta E_{n0}^{\text{eff}}}{E_{n0}} = 2 \frac{a_0}{\Lambda} \quad \text{bzw.} \quad \frac{\Delta E_{n1}^{\text{eff}}}{E_{n1}} = \frac{2}{3} (q_{n1}\Lambda)^2 \left(\frac{a_1}{\Lambda}\right)^3. \quad (7.50)$$

Die relative Energieverschiebung für s-Wellenzustände ist im Rahmen der Streulängenformulierung der effektiven Kontaktwechselwirkung proportional zur s-Wellenstreulänge  $a_0$  und unabhängig von der Absolutenergie des Zustandes. Im Gegensatz dazu ist die relative Energieverschiebung der p-Wellenzustände proportional zur Energie und zur dritten Potenz der p-Wellenstreulänge  $a_1$ .

Für das Kastenpotential kann die Streuphase in Partialwellenzerlegung analytisch angegeben werden [Joac79]

$$\tan \eta_l(q) = \frac{q j_l'(q\lambda) - \gamma_l j_l(q\lambda)}{q n_l'(q\lambda) - \gamma_l n_l(q\lambda)} \quad \text{mit} \quad \gamma_l = \frac{Q j_l'(Q\lambda)}{j_l(Q\lambda)}. \quad (7.51)$$

Daraus ergeben sich folgende analytische Formen für die s- und p-Wellenstreulänge:

$$\frac{a_0}{\lambda} = 1 - \frac{\tan(\lambda\sqrt{V_0})}{\lambda\sqrt{V_0}}, \quad \left(\frac{a_1}{\lambda}\right)^3 = 1 - \frac{3}{(\lambda\sqrt{V_0})^2} + 3 \frac{\cot(\lambda\sqrt{V_0})}{\lambda\sqrt{V_0}}. \quad (7.52)$$

Damit ist die Energieverschiebung formuliert durch die Streuphasen (7.26) bzw. die Streulängen (7.50) geschlossen als Funktion der Potentialparameter und des Impulses gegeben. Im folgenden werden die so auf Basis der effektiven Kontaktwechselwirkung gewonnenen Energien unter verschiedenen Aspekten mit den exakten Energieeigenwerten verglichen.

In Anlehnung an die Diskussion in Abschnitt 7.3.2 wird zuerst die relative Energieverschiebung für s- und p-Wellenzustände als Funktion der Potentialstärke  $\lambda\sqrt{V_0}$  betrachtet. In Abbildung 7.4 ist die exakte und die in der Streulängenformulierung der Kontaktwechselwirkung berechnete Energieverschiebung des Grundzustandes und des 5. bzw. 10. angeregten Zustandes gezeigt. Wie bereits beschrieben, ist die relative Energieverschiebung für s-Wellenzustände im Bereich der Plateaus unabhängig von der Hauptquantenzahl und stimmt ausgezeichnet mit der mittels Kontaktwechselwirkung berechneten Energieverschiebung überein. Für den Grundzustand und den 5. angeregten Zustand gilt die hervorragende Übereinstimmung bis in den Bereich der Resonanzen hinein. Für den 10. angeregten Zustand wird die relative Nähe der benachbarten angeregten Zustände deutlich. Die exakte relative Energieverschiebung steigt hier weniger stark an und geht schnell in das nächste Plateau über, diese Auswaschung der Plateauflanken wird in der effektiven Beschreibung durch die Streulänge nicht berücksichtigt.

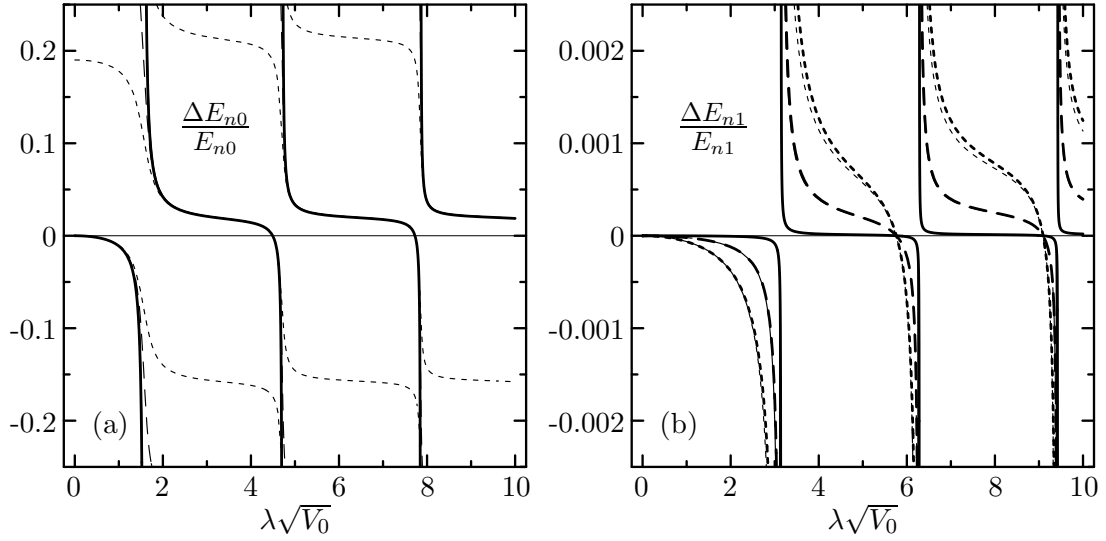


Abbildung 7.4 · Exakte relative Energieverschiebung für s-Wellenzustände (a) und p-Wellenzustände (b) in Abhängigkeit von der Potentialstärke für den Grundzustand (—), den 5. angeregten Zustand (---) und den 10. angeregten Zustand (-----) im Vergleich zur genäherten Energieverschiebung (—), (---) und (-----) entsprechend der effektiven Kontaktwechselwirkung in Streulängenformulierung. Für s-Wellenzustände (a) sind diese Kurven deckungsgleich, da die relative Energieverschiebung unabhängig von der Hauptquantenzahl ist.

In der Streuphasenformulierung reproduziert die Kontaktwechselwirkung auch dieses Verhalten, die entsprechenden Kurven wären in der Abbildung nicht von der exakten Energieverschiebung zu unterscheiden.

Der wesentliche Unterschied der p-Wellenzustände verglichen mit dem s-Wellenspektrum besteht in der Abhängigkeit der relativen Energieverschiebung von der Absolutenergie, wie die Abbildung 7.4(b) zeigt. Für die niedrigsten Niveaus ist die relative Energieverschiebung der p-Welle um zwei bis drei Größenordnungen kleiner als die der s-Welle, sie wächst jedoch proportional der Absolutenergie an. Darüber hinaus ist die Resonanzstruktur in der Wechselwirkungsstärke um  $\pi/2$ , d.h. den halben Abstand zwischen den resonanten Potentialstärken, verschoben. Bei gegebener Potentialstärke kann also nur eine s-Wellen- oder eine p-Wellenresonanz auftreten, nie jedoch beides. Die effektive Kontaktwechselwirkung reproduziert die exakten Energieverschiebungen im gesamten dargestellten Bereich sehr gut. Nur bei hoch angeregten Zuständen treten minimale Abweichungen auf, die sich mit wachsender Absolutenergie vergrößern.

Diese Beobachtungen — wie auch die formale Herleitung — legen es nahe anzunehmen, daß die Qualität der effektiven Kontaktwechselwirkung von zwei Größen bestimmt wird: Streulänge und Impuls. Um den Zusammenhang deutlich zu machen, ist in Abbildung 7.5 die skalierte Energieverschiebung als Funktion der Streulänge für Zustände verschiedener Impulse aufgetragen. Die Skalierung ist gerade so gewählt, daß die Energieverschiebungen der Kontaktwechselwirkung in Streulängenformulierung (7.50) auf der Winkelhalbierenden liegen. Für die Berechnung werden Potentialstärken zugrundegelegt, für die das Kastenpotential drei gebundene Zustände beherbergt. Die Zahl der gebundenen Zustände hat nur marginalen Einfluß auf die Kurven, so daß diese Annahme keine Beschränkung der Allgemeinheit bedeutet. Für jede Potentialstärke aus diesem Bereich kann sodann die exakte Energieverschiebung, die Streulänge und die

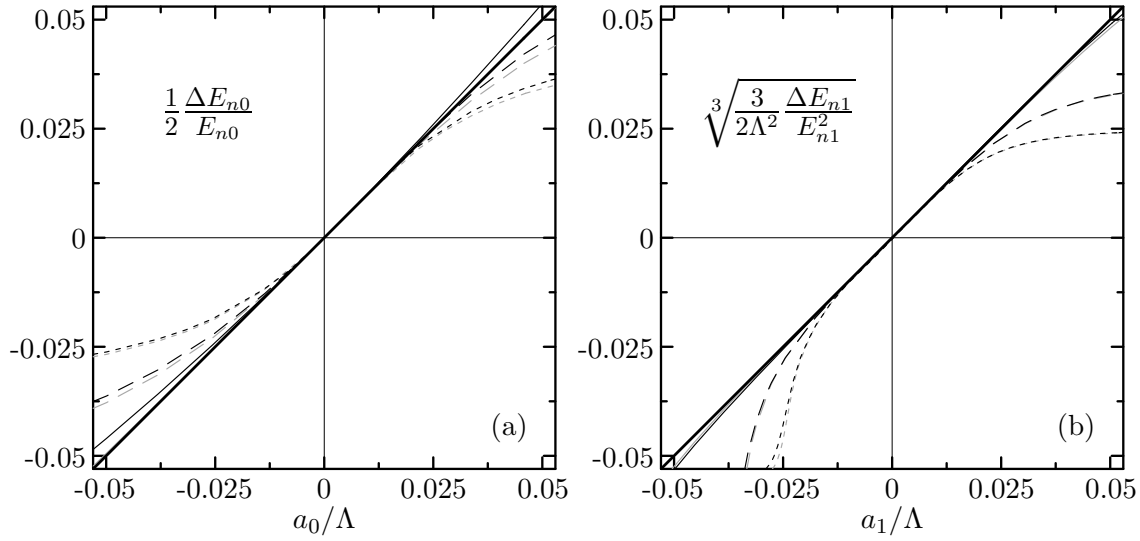


Abbildung 7.5 · Skalierte Energieverschiebung als Funktion der Streulänge für das s-Wellenspektrum (a) und das p-Wellenspektrum (b). Die dünnen schwarzen Kurven geben die exakte Energieverschiebung des Grundzustandes (—), des 5. angeregten (---) und des 10. angeregten Zustandes (-----) an. Die entsprechenden grauen Kurven zeigen die Energieverschiebung der effektiven Kontaktwechselwirkung in Streuphasenformulierung. Die Winkelhalbierende (—) entspricht dem Ergebnis der Kontaktwechselwirkung in Streulängenformulierung. Der Berechnung wurden Kastenpotentiale mit drei gebundenen Zuständen zugrundegelegt.

Energieverschiebung der Kontaktwechselwirkung berechnet werden.

Wie die Abbildung 7.5 zeigt, beschreibt die effektive Kontaktwechselwirkung in Streulängenformulierung die Energieverschiebung sehr gut, wenn entweder Streulänge oder die Absolutenergie hinreichend klein ist. Für den Grundzustand stimmt die Energieverschiebung im gesamten betrachteten Streulängenintervall hervorragend mit den exakten Werten überein. Mit höheren Energien treten bei großen Streulängen Abweichungen auf, die mit der Absolutenergie des Zustandes anwachsen und bei immer kleineren Streulängen relevant werden. Die Beobachtung, daß eine kleine Streulänge  $a_l$  oder ein kleiner Impuls  $q$  bereits ausreichen, um die Qualität der Kontaktwechselwirkung zu sichern, legt es nahe, daß der relevante *Kleinheitsparameter* durch das Produkt  $q a_l$  gegeben ist.

In der Abbildung 7.5 ist auch die aus der Kontaktwechselwirkung in Streuphasenformulierung (7.26) resultierende Energieverschiebung dargestellt (graue Kurven). Sie stimmt auch für hohe Impulse und große Streulängen sehr gut mit der exakten Rechnung überein. Die Beschreibung verbessert sich sogar mit wachsendem Impuls. Das macht deutlich, daß die Kontaktwechselwirkung in der vollen Streuphasenformulierung eine universelle effektive Wechselwirkung darstellt, die weit über den im folgenden betrachteten Rahmen anwendbar ist. Es ist der Übergang zu impulsunabhängigen Kopplungsstärken, ausgedrückt durch die Streulängen, der den Gültigkeitsbereich einschränkt. Für Anwendungen, die über diesen Gültigkeitsbereich hinausgehen, muß die Parametrisierung der Streuphasen (7.37) entsprechend erweitert werden.

### 7.3.5 Qualität der Kontaktwechselwirkung

Um ein quantitatives Maß für die Gültigkeit der effektiven Kontaktwechselwirkung zu erhalten, wird die Absolutenergie  $\bar{E}_{nl}^{\text{eff}}$ , berechnet mit der Streulängenformulierung der Kontaktwechselwirkung, mit der exakten Energie  $\bar{E}_{nl}$  für verschiedene Streulängen und Impulse verglichen. In Abbildung 7.6 ist die relative Abweichung  $|\bar{E}_{nl}^{\text{eff}} - \bar{E}_{nl}|/\bar{E}_{nl}$  als Konturgraphik über Streulänge und Impuls bzw. Impuls und Kleinheitsparameter  $q a_l$  für das s- und p-Wellenspektrum aufgetragen. Die Konturlinien entsprechend relativen Abweichungen von 0.5%, 1%, 2%, 5% und 10%.

In der Darstellung über Streulänge und Impuls in den oberen Teilbildern ist augenfällig, daß die Abweichung nur dann große Werte annimmt, wenn Streulänge und Impuls groß sind. Ist einer der beiden Parameter klein, so verringert sich auch der Fehler deutlich. Für s-Wellenzustände tritt bei kleinen Impulsen und großen Streulängen eine komplizierte Struktur auf, die vorrangig vom Grundzustand hervorgerufen wird. Wie die Abbildung 7.5(a) zeigt, liegt die mit der Kontaktwechselwirkung berechnete Energie für den Grundzustand bei positiven Streulängen unterhalb der exakten, während sie für die angeregten Zustände oberhalb der exakten Energie liegt. Im Konturplot findet sich dieser Effekt als Tal minimaler Energieabweichung bei  $q \approx 10/\Lambda$ , das entspricht dem 2. angeregten Zustand, wieder. Bei kleineren Impulsen ist die Energieabweichung für das s-Wellenspektrum negativ, bei größeren positiv.

Die Darstellung der relativen Energieabweichung als Funktion von Impuls und Kleinheitsparameter in den unteren beiden Teilbildern klärt die Rolle der Größe  $q a_l$ : Sie gilt allenfalls als grobes Maß für die Qualität der Kontaktwechselwirkung in Streulängenformulierung, genügt jedoch nicht, um quantitative Aussagen zu machen. Die Konturplots zeigen, daß der maximale Kleinheitsparameter, der zulässig ist, um eine bestimmte relative Energieabweichung nicht zu überschreiten, praktisch linear mit dem Impuls anwächst. Wird z.B. eine einprozentige Energieabweichung toleriert, so kann der Kleinheitsparameter für s-Wellenzustände bei  $q \approx 25/\Lambda$  einen Maximalerwert von ca. 1 annehmen. Dagegen liegt der Maximalwert für  $q \approx 90/\Lambda$  sogar bei  $q a_0 \approx 2$ .

Bemerkenswert ist der Absolutwert des Kleinheitsparameters  $q a_l$ . Für die diskutierte einprozentige Abweichung liegt der erlaubte Kleinheitsparameter mit Ausnahme der niedrigsten Impulse in der Größenordnung 1. In Anbetracht dieser Untersuchung eines Modellsystems ist die Forderung  $q a_l \ll 1$ , die bei der formalen Streuphasenparametrisierung gemacht wurde, zu streng. Der Grund für diese Diskrepanz liegt zum Teil in der Begriffsdefinition. Für die praktische Anwendung der Kontaktwechselwirkung ist der Fehler bei der Beschreibung der Energie eines Niveaus relevant, dementsprechend wird in den Konturplots dieser Fehler aufgetragen. Bei der formalen Herleitung wurden dagegen Energieverschiebungen gegenüber den freien Energieniveaus diskutiert. Deren *relative* Fehler sind um das Verhältnis von Energieverschiebung und Absolutenergie größer als die relativen Fehler der Gesamtenergie. Ein relativer Fehler von 1% in der Gesamtenergie eines s-Wellenzustandes entspricht bei einer Streulänge von  $a_0/\Lambda \sim 0.05$  einem relativen Fehler von 10% in der Energieverschiebung, wie sich aus Abbildung 7.5 ergibt.

In den folgenden Kapiteln soll die effektive Kontaktwechselwirkung in Streulängenformulierung auf fermionische Vielteilchensysteme angewendet werden und es stellt sich die Frage, wie gut diese Beschreibung für die Energie des Vielteilchensystems ist. Es ist nicht unmittelbar möglich, aus der hier diskutierten Fehlerabschätzung auf die quantitative Abweichung der Vielteilchenenergie zu schließen. Dennoch kann angenommen

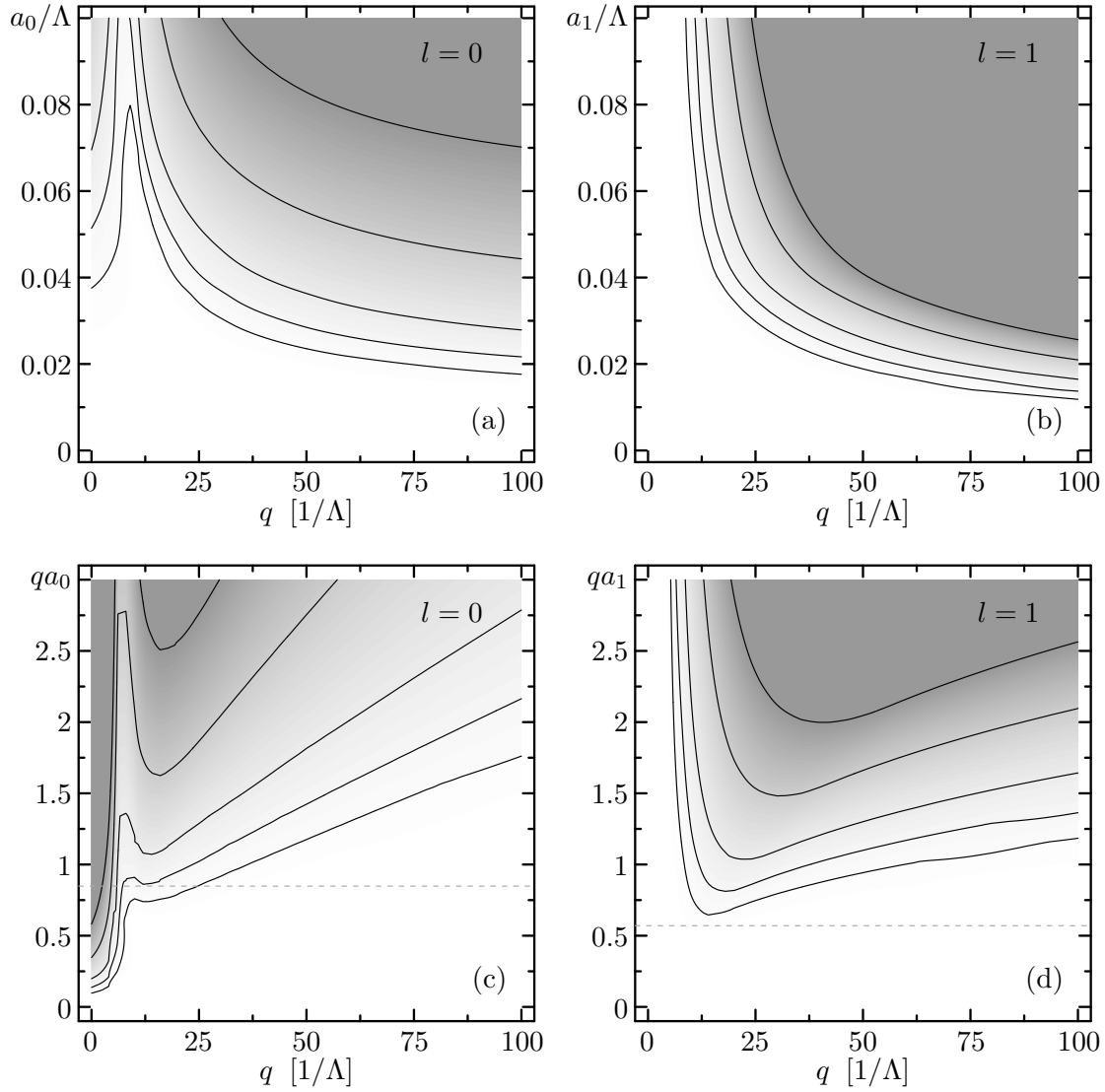


Abbildung 7.6 · Konturplots der relativen Abweichung  $|\bar{E}_{nl}^{\text{eff}} - \bar{E}_{nl}|/E_{nl}$  der Energie berechnet mit der Kontaktwechselwirkung in Streulängenformulierung von der exakten Energie für s-Wellen (a,c) und p-Wellenzustände (b,d). Die obere Reihe zeigt die Abweichung als Funktion der Streulänge und des Impulses, die untere als Funktion des Impulses und des dimensionslosen Parameters  $qa_l$ . Die Konturlinien entsprechen 0.5%, 1%, 2%, 5% und 10% (von unten nach oben) relativer Abweichung von der exakten Energie. Das zugrundeliegende Potential beherbergt 3 gebundene Zustände.

werden, daß Abweichungen der Zweiteilchenenergie von der Größenordnung 1% zu einer ausreichend genauen Näherung für die Vielteilchenenergie führen. Die typische Größenordnung der Zweiteilchen-Relativimpulse  $q$  im Vielteilchensystem kann durch den Erwartungswert des quadratischen Relativimpulses im wechselwirkungsfreien Fermigas abgeschätzt werden

$$\langle \mathbf{q}^2 \rangle = \left( \frac{4}{3} \pi \kappa^3 \right)^{-2} \int d^3 k_1 d^3 k_2 \frac{1}{4} (\vec{k}_1 - \vec{k}_2)^2 = \frac{3}{10} \kappa^2. \quad (7.53)$$

Die Integrationen erstrecken sich über alle Einteilchenimpulse  $\vec{k}$  mit Beträgen kleiner

dem Fermiimpuls  $\kappa$ . Daraus ergibt sich eine Abschätzung für den typischen Zweiteilchen-Relativimpuls als Funktion des Fermiimpulses  $\kappa$

$$q \sim \sqrt{3/10} \kappa \approx 0.54 \kappa. \quad (7.54)$$

Damit lassen sich die Achsen der Abbildungen 7.6 auf den Fermiimpuls des Vielteilchensystems umskalieren, um die typische Abweichung der Zweiteilchenenergien im Vielteilchensystem zu bestimmen.

Als Ausgangspunkt für die Untersuchungen der folgenden beiden Kapitel läßt sich hier festhalten, daß im Rahmen eines einprozentigen Fehlers der Zweiteilchenenergien, die Streulängennäherung bis zu typischen Werten

$$\kappa a_0 \sim 3 \quad \text{und} \quad \kappa a_1 \sim 2 \quad (7.55)$$

anwendbar ist. Im Vorgriff auf die Ergebnisse des Kapitels 9 zeigen die grauen punktierten Linien in den Abbildungen 7.6(c) bzw. (d) die entsprechend skalierten Stabilitätsgrenzen für ein zweikomponentiges Fermigas mit s-Wellenwechselwirkung (9.18) bzw. für ein einkomponentiges Fermigas mit p-Wellenwechselwirkung (9.9). In beiden Fällen bewegt man sich bei den relevanten Impulsen weit unterhalb der 1%-Kontur, so daß die Streulängennäherung der effektiven Kontaktwechselwirkung eine gute Näherung bildet.



## Thomas-Fermi-Näherung mit effektiver Kontaktwechselwirkung

### 8.1 Präludium: Dichtefunktionaltheorie

Zwei Klassen quantenmechanischer Vielteilchenprobleme wurden bereits im ersten Teil dieser Arbeit behandelt: Homogene Materie am Beispiel der Kern- und Neutronenmaterie sowie der  ${}^4\text{He}$ -Flüssigkeit und Wenigteilchensysteme speziell am Beispiel kleiner  ${}^4\text{He}$ -Tröpfchen. Für beide Klassen existieren eine Reihe hochentwickelter Näherungsverfahren sowie quasiexakte Methoden.

Dieser Teil der Arbeit richtet sein Augenmerk auf Systeme die zwischen den beiden genannten Klassen anzusiedeln sind, nämlich inhomogene System mit Teilchenzahlen in der Größenordnung  $10^6$ . Vergleichbare Systeme finden sich in der Festkörperphysik, speziell auf den Gebiet der Clusterphysik und der Physik komplexer Moleküle. Es geht darum, das quantenmechanische Vielteilchenproblem der Elektronen in einem komplexen Molekül oder Cluster von einigen hundert oder tausend Atomen unter Berücksichtigung der Coulombwechselwirkung zwischen den Elektronen, sowie der Wechselwirkung der Elektronen mit den Atomrümpfen, die durch ein mittleres Potential beschrieben wird, zu lösen.

#### 8.1.1 Energiefunktional und Hohenberg-Kohn-Theorem

Der allgemeine theoretische Rahmen für die Behandlung derartiger Probleme wird von der sog. *Dichtefunktionaltheorie* gesteckt. Sie baut auf dem von P. Hohenberg und W. Kohn im Jahre 1965 beschriebenen *Hohenberg-Kohn-Theorem* [HoKo64, Sche99] auf, dessen Aussage sich in zwei Punkten fassen läßt:

- Die Grundzustandsenergie eines Vielteilchensystems ist ein Funktional der Einteilchendichte des Grundzustandes:  $E = E[\rho]$
- Das Energiefunktional  $E[\rho]$  nimmt bei Variation der Dichte ein Minimum bei der Grundzustandsdichte an.

Die praktische Bedeutung des Hohenberg-Kohn-Theorems liegt in den Aussagen, daß eine Darstellung der Grundzustandsenergie als Funktional der Einteilchendichte exi-

stiert und daß die Energie und die Einteilchendichte des Grundzustandes durch ein Variationsverfahren bestimmt werden können. Es macht allerdings keine Aussage über die Konstruktion des Energiefunktional  $E[\rho]$  bzw. über geeignete Näherungen hierfür. Ebenso wenig gibt es Aufschluß über die Struktur der angeregten Zustände, sofern sie nicht eine andere Symmetrie als der Grundzustand aufweisen.

Um die weitere Diskussion übersichtlich zu halten, werden Hamiltonoperatoren der allgemeinen Form

$$\mathbf{H} = \mathbf{T} + \mathbf{V} + \mathbf{U} \quad (8.1)$$

betrachtet. Dabei ist  $\mathbf{T}$  der Einteilchenoperator der kinetischen Energie,  $\mathbf{V}$  der Operator einer Zweiteilchenwechselwirkung und  $\mathbf{U}$  der Operator eines externen Einteilchenpotentials. Das exakte Energiefunktional wird in eine entsprechende Struktur aufgespalten

$$E[\rho] = T[\rho] + V[\rho] + U[\rho]. \quad (8.2)$$

Darüber hinaus wird vorläufig davon ausgegangen, daß im System nur eine Teilchensorte vorhanden ist, die durch die Einteilchendichte  $\rho(\vec{x})$  beschrieben wird. Die Verallgemeinerung auf verschiedene Teilchensorten  $\xi$  mit verschiedenen Einteilchendichten  $\rho_\xi(\vec{x})$  wird später diskutiert.

Das Energiefunktional kann o.B.d.A. als Integral über die lokale Energiedichte  $\mathcal{E}[\rho](\vec{x})$  geschrieben werden

$$E[\rho] = \int d^3x \mathcal{E}[\rho](\vec{x}) = \int d^3x (\mathcal{T}[\rho](\vec{x}) + \mathcal{V}[\rho](\vec{x}) + \mathcal{U}[\rho](\vec{x})). \quad (8.3)$$

Die Schreibweise  $\mathcal{E}[\rho](\vec{x})$  soll andeuten, daß die Energiedichte ein Funktional der Einteilchendichte und eine Funktion des Ortes ist. Der Beitrag des externen Einteilchenpotentials zur Energie bzw. die zugehörige Energiedichte kann analytisch angegeben werden

$$U[\rho] = \int d^3x \mathcal{U}[\rho](\vec{x}) = \int d^3x U(\vec{x}) \rho(\vec{x}). \quad (8.4)$$

Die verbleibenden Terme der kinetischen Energie und der Zweiteilchenwechselwirkung bilden ein universelles Funktional

$$\hat{E}[\rho] = T[\rho] + V[\rho], \quad (8.5)$$

das nicht vom externen Feld abhängt [Sche99]. Es ist von den intrinsischen Eigenschaften des Systems, wie z.B. dem bosonischen oder fermionischen Charakter der Teilchen und der Gestalt der Zweiteilchenwechselwirkung, abhängig. Seine Bestimmung — genauer, die Wahl geeigneter Näherungen — stellen das Hauptproblem bei der Anwendung der Dichtefunktionaltheorie dar.

### 8.1.2 Semiklassische Beschreibung und Thomas-Fermi-Näherung

Eine Möglichkeit, eine systematische Entwicklung für das universelle Energiefunktional zu konstruieren, basiert auf einer *semiklassischen Näherung*. Es wird davon ausgegangen, daß sich die exakte Energie des Vielteilchensystems — oder der Erwartungswert jeder anderen Observable — formal in zwei Beiträge zerlegen läßt: Der erste Beitrag

zeigt als Funktion von makroskopischen Parametern wie Teilchenzahl und Deformation ein glattes Verhalten und macht den größten Teil der Energie aus. Der zweite Beitrag wird von quantenmechanischen Effekten dominiert und zeigt eine strukturreiche Abhängigkeit von den makroskopischen Parametern. In der Kernphysik ist diese Aufteilung als Strutinskytheorem [GrVo79] bekannt. Sie manifestiert sich in der Beschreibung der Bindungsenergien der Kerne durch einen glatten Teil — das Tröpfchenmodell — und einen stark fluktuierenden Teil — die Schalenkorrekturen. Der glatte Teil beschreibt eine semiklassische Näherung der Energie des Quantensystems, in der Quantenfluktuationen herausgemittelt sind. Offenbar liefert eine solche Näherung gute Resultate, wenn Quantenfluktuationen vernachlässigbar sind. Das ist der Fall, wenn die Teilchenzahl des Systems groß wird, wie in Abschnitt B.2 des Anhangs am Beispiel des freien Fermigases demonstriert wird. Für die hier untersuchten ultrakalten atomaren Gase mit typischen Teilchenzahlen von  $10^6$  ist eine semiklassische Beschreibung in jedem Fall angemessen.

Geht man von einer Beschreibung des Vielteilchensystems im Rahmen eines Modells unabhängiger Teilchen aus, so läßt sich unter Zuhilfenahme der semiklassischen Näherung eine systematische Entwicklung, die sog. *Gradientenentwicklung* oder  *$\hbar$ -Entwicklung* [RiSc80, BrGu85, GrVo79] der Energiedichte konstruieren. Für die Details des Formalismus sei auf die genannten Referenzen und die darin enthaltenen Zitate verwiesen. Die Gradientenentwicklung führt auf eine Darstellung der semiklassischen Energiedichte als Summe über verschiedene Gradientenordnungen der Einteilchendichte. Für die kinetische Energiedichte  $\mathcal{T}$  eines einkomponentigen Fermigases lauten die ersten Terme [GrVo79, BrGu85]

$$\mathcal{T}[\rho](\vec{x}) = \frac{3(6\pi^2)^{2/3}}{10m} \rho^{5/3}(\vec{x}) + \frac{1}{72m} \frac{|\vec{\nabla}\rho(\vec{x})|^2}{\rho(\vec{x})} + \frac{1}{6m} \Delta\rho(\vec{x}) + \dots \quad (8.6)$$

Der erste Term ist nur vom lokalen Wert der Dichte abhängig, nicht jedoch von deren funktionalem Verlauf. Alle weiteren Terme beinhalten Ableitungen, die sensitiv auf räumliche Variationen der Dichte sind.

Bei der sog. *Lokale-Dichte-* oder *Thomas-Fermi-Näherung* geht man von der Annahme aus, daß die Dichte des Vielteilchensystems nur schwach vom Ort abhängt und alle Ableitungsterme vernachlässigbar sind. Das Grundprinzip dieser Näherung besteht darin, die Energiedichte  $\hat{\mathcal{E}}[\rho](\vec{x})$  des inhomogenen Vielteilchensystems lokal durch die Energiedichte  $\mathcal{E}_{\text{hom}}(\rho)$  des entsprechenden homogenen Systems zu beschreiben

$$\hat{\mathcal{E}}[\rho](\vec{x}) \stackrel{\text{TFN}}{=} \mathcal{E}_{\text{hom}}(\rho(\vec{x})). \quad (8.7)$$

Die Thomas-Fermi-Näherung ist anwendbar, solange der lokale Term in der Gradientenentwicklung (8.6) wesentlich größer als der erste Gradiententerm ist. Diese Annahme wird zwangsläufig an der Oberfläche des inhomogenen Systems verletzt, dementsprechend ist die Thomas-Fermi-Näherung nicht in der Lage, die Dichte oder Energiedichte an der Oberfläche des System korrekt zu beschreiben. In Systemen großer Teilchenzahl, wie sie im folgenden untersucht werden sollen, hat das nur geringe Auswirkungen auf die Energie und das Dichteprofil. Im Abschnitt B.2 des Anhangs wird am Beispiel des freien Fermigases im externen Potential explizit gezeigt, daß sich die Thomas-Fermi-Näherung ausgezeichnet für die im folgenden untersuchten Systeme eignet.

## 8.2 Energiedichte des homogenen Fermigases

Der erste Schritt zur Darstellung des Energiefunktional eines inhomogenen Systems in Thomas-Fermi-Näherung ist die Berechnung der Energiedichte des entsprechenden homogenen Systems. Dieser Abschnitt widmet sich daher dem homogenen wechselwirkenden Fermigas, dessen Energiedichte unter Verwendung der effektiven Kontaktwechselwirkung, wie sie im vorangehenden Kapitel abgeleitet wurde, berechnet wird.

### 8.2.1 Hamiltonoperator und Zustände

Gegeben sei ein homogenes Gas aus  $\Xi$  unterscheidbaren Fermionensorten — im folgenden auch Spezies genannt — die durch ein von der Teilchensorte unabhängiges Potential miteinander wechselwirken. Die Wechselwirkung wird durch die s- und p-Wellenbeiträge der effektiven Kontaktwechselwirkung entsprechend Abschnitt 7.2 beschrieben

$$\mathbf{v}^{\text{eff}} = \mathbf{v}_0^{\text{eff}} + \mathbf{v}_1^{\text{eff}} = g_0 \delta^{(3)}(\vec{\mathbf{r}}) + g_1 \mathbf{q}_r^\dagger \delta^{(3)}(\vec{\mathbf{r}}) \mathbf{q}_r, \quad (8.8)$$

wobei  $\mathbf{q}_r := \vec{\mathbf{n}}_r \vec{\mathbf{q}}$  den Radialteil des Relativimpuls zweier Teilchen beschreibt. Die Wechselwirkungsstärken

$$g_0 = \frac{4\pi}{m} a_0 \quad , \quad g_1 = \frac{12\pi}{m} a_1^3. \quad (8.9)$$

sind entsprechend (7.38) für kleine Relativimpulse durch die s-Wellen- bzw. p-Wellenstreulänge bestimmt. Der Hamiltonoperator für das homogene Fermigas besteht aus dem Beitrag der kinetischen Energie und der effektiven Kontaktwechselwirkung für s- und p-Welle

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & \frac{1}{2m} \sum_i \vec{\mathbf{p}}^2(i) \\ & + g_0 \sum_{i < j} \delta^{(3)}(\vec{\mathbf{r}}(ij)) \\ & + g_1 \sum_{i < j} \mathbf{q}_r^\dagger(ij) \delta^{(3)}(\vec{\mathbf{r}}(ij)) \mathbf{q}_r(ij). \end{aligned} \quad (8.10)$$

Es wird sich zeigen, daß der p-Wellenbeitrag der Kontaktwechselwirkung für die Untersuchung eines Fermigases wesentlich ist, denn nur über diesen Term können identische Fermionen miteinander wechselwirken.

Wie bereits bei der allgemeinen Diskussion bemerkt, können derartige Kontaktwechselwirkungen nur im Rahmen eines Mean-Field-Modells verwendet werden. Die exakte Lösung des Vielteilchenproblems für den Hamiltonoperator (8.10) hat keine physikalische Bedeutung. Für ein homogenes — d.h. translations und rotationsinvariantes — System von Fermionen wird der Vielteilchen-Grundzustand in Mean-Field-Näherung durch das antisymmetrisierte Produkt von Einteilchenzuständen, die Eigenzustände zum Impulsoperator sind, beschrieben. Dies wurde bereits in Abschnitt 2.1.1 für homogene Kernmaterie und Neutronenmaterie diskutiert. Der Ortsanteil der Einteilchenzustände ist durch eine ebene Welle mit Impulsvektor  $\vec{k}$  gegeben:

$$\langle \vec{x} | \vec{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i \vec{k} \cdot \vec{x}), \quad (8.11)$$

dabei bezeichnet  $V$  das Volumen eines Kubus mit periodischen Randbedingungen, der für die Berechnung der Erwartungswerte zugrundegelegt wird.

Da Systeme mit verschiedenen Fermionenspezies untersucht werden sollen, wird der Einteilchenzustand neben dem Impuls  $\vec{k}$  durch eine zusätzliche formale Quantenzahl  $\xi$  gekennzeichnet

$$|i\rangle = |\vec{k}_i\rangle \otimes |\xi_i\rangle. \quad (8.12)$$

Damit ist die Energiedichte des mehrkomponentigen Systems eine Funktion der Dichten  $\rho_\xi$  der einzelnen Spezies. Es sei angenommen, daß die Wechselwirkung zwischen den Teilchen unabhängig von dieser Quantenzahl ist. Der physikalische Ursprung dieser Speziesquantenzahl hängt von dem betrachteten System ab. In den im folgenden Kapitel untersuchten Atomen in Fallen numeriert sie die verschiedenen  $m$ -Quantenzahlen des Gesamtdrehimpulses, die für die Niveaufspaltung im äußeren magnetischen Feld entscheidend sind.

### 8.2.2 Energiedichte

Im Rahmen des Mean-Field-Zugangs wird die Energiedichte des Grundzustandes eines Fermigas bestehend aus  $\Xi$  Teilchenspezies unter Verwendung des Hamiltonoperators (8.10) bestimmt. Für homogene Systeme ist die Energiedichte definiert als

$$\mathcal{E}_{\text{hom}} = \langle \mathbf{H} \rangle / V. \quad (8.13)$$

Zweckmäßigerweise wird die Energiedichte in eine dem Hamiltonoperator entsprechende Struktur, bestehend aus kinetischer Energiedichte  $\mathcal{T}$ , Energiedichten der s-Wellenwechselwirkung  $\mathcal{V}_0^{\text{eff}}$  sowie p-Wellenwechselwirkungsichte  $\mathcal{V}_1^{\text{eff}}$ , zerlegt

$$\mathcal{E}_{\text{hom}} = \mathcal{T} + \mathcal{V}_0^{\text{eff}} + \mathcal{V}_1^{\text{eff}}. \quad (8.14)$$

Die Berechnung der einzelnen Terme verläuft analog zu dem in Abschnitt 2.1.2 gezeigten. Die Summation über die Teilchenindizes  $i$  und  $j$  läuft über alle besetzten Einteilchenzustände. Sie läßt sich in eine Summation über die Teilchenspezies  $\xi$  und den Fermiimpuls  $\kappa_\xi$  zerlegen<sup>1</sup>. Hier ist zu beachten, daß der Fermiimpuls für die einzelnen Spezies im allgemeinen verschieden sein kann. Weiterhin kann der Kontinuumsliches benutzt werden, um die Summation über den Impuls in eine Integration zu überführen. Die Details dieser Rechnung finden sich in Anhang A.1, an dieser Stelle werden nur die Ergebnisse zusammengefaßt.

Für die kinetische Energiedichte ergibt sich unter Verwendung von (A.12)

$$\begin{aligned} \mathcal{T} &= \frac{1}{2mV} \sum_i \langle i | \vec{p}^2 | i \rangle = \frac{1}{2mV} \sum_\xi \sum_{\vec{k}}^{\kappa_\xi} \langle \vec{k} | \vec{p}^2 | \vec{k} \rangle \\ &= \frac{1}{20\pi^2 m} \sum_\xi \kappa_\xi^5. \end{aligned} \quad (8.15)$$

Die Summation über die formale Quantenzahl  $\xi$  erstreckt sich hier wie im folgenden über alle  $\Xi$  Teilchenspezies. Die Summation über die Impulsvektoren der Einteilchenzustände  $\vec{k}$  erstreckt sich über die Fermikugel der jeweiligen Spezies, d.h.  $|\vec{k}| \leq \kappa_\xi$ .

<sup>1</sup>Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird der Fermiimpuls der Teilchenspezies  $\xi$  in diesem und im folgenden Kapitel mit  $\kappa_\xi$  statt mit  $(k_F)_\xi$  bezeichnet.

Für die Wechselwirkungsichten wird die übliche Zerlegung in direkten und Austauschteil vorgenommen:  $\mathcal{V} = \mathcal{V}|_{\text{di}} + \mathcal{V}|_{\text{xc}}$ . Ferner wird die Berechnung der Beiträge der Kontaktwechselwirkung zunächst formal für eine Wechselwirkung  $v(r)$  mit endlicher Reichweite ausgeführt. Die Spezialisierung auf die effektive Kontaktwechselwirkung mit verschwindender Reichweite wird erst zum Abschluß der Rechnung vorgenommen.

Zunächst der s-Wellenbeitrag: Für den direkten Term mit beliebiger Radialabhängigkeit folgt unter Verwendung von (A.14)

$$\begin{aligned}\mathcal{V}_0|_{\text{di}} &= \frac{1}{2V} \sum_{i,j} \langle ij | v(\mathbf{r}) | ij \rangle = \frac{1}{2V} \sum_{\xi, \xi'} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}'}^{\kappa_{\xi}} \sum_{\vec{k}'}^{\kappa_{\xi'}} \langle \vec{k} \vec{k}' | v(\mathbf{r}) | \vec{k} \vec{k}' \rangle \\ &= \frac{1}{72\pi^4} \left[ \sum_{\xi} \kappa_{\xi}^6 + 2 \sum_{\xi' > \xi} \kappa_{\xi}^3 \kappa_{\xi'}^3 \right] \int d^3r v(r).\end{aligned}\quad (8.16)$$

Für den entsprechenden Austauschterm ergibt sich mit (A.15)

$$\begin{aligned}\mathcal{V}_0|_{\text{xc}} &= -\frac{1}{2V} \sum_{i,j} \langle ij | v(\mathbf{r}) | ji \rangle = -\frac{1}{2V} \sum_{\xi, \xi'} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}'}^{\kappa_{\xi}} \sum_{\vec{k}'}^{\kappa_{\xi'}} \langle \vec{k} \vec{k}' | v(\mathbf{r}) | \vec{k}' \vec{k} \rangle \\ &= -\frac{1}{72\pi^4} \sum_{\xi} \kappa_{\xi}^6 \int d^3r v(r) l_1^2(\kappa_{\xi} r),\end{aligned}\quad (8.17)$$

dabei ist  $l_1(x)$  die bekannte Slaterfunktion, gegeben durch

$$l_1(x) = 3 \frac{j_1(x)}{x}. \quad (8.18)$$

Die Spezialisierung der Radialabhängigkeit auf eine Kontaktwechselwirkung  $v(r) \propto \delta^{(3)}(r)$  reduziert das Ortsintegral im direkten Term auf die Eins. Im Austauschterm reduziert sich das Integral auf den Grenzwert der Funktion  $l_1^2(x)$  für  $x \rightarrow 0$

$$\lim_{x \rightarrow 0} l_1^2(x) = 1. \quad (8.19)$$

Damit sind die Vorfaktoren von direktem und Austauschterm bis auf das Vorzeichen identisch, und der  $\kappa_{\xi}^6$ -Term hebt sich heraus. Für die Wechselwirkungsichte des s-Wellenkontaktpotentials verbleibt lediglich der gemischte Term

$$\mathcal{V}_0^{\text{eff}} = \frac{g_0}{36\pi^4} \sum_{\xi' > \xi} \kappa_{\xi}^3 \kappa_{\xi'}^3. \quad (8.20)$$

Hier ergibt sich eine erste physikalische Konsequenz: Der s-Wellenteil der effektiven Kontaktwechselwirkung kann als Folge der verschwindenden Potentialreichweite und der Antisymmetrie des Zustandes nur zwischen verschiedenen Teilchenspezies wirken. Innerhalb einer Teilchenspezies liefert er keinen Beitrag. Betrachtet man also ein Fermigas mit nur einer Teilchensorte, so spielt die s-Wellenkomponente der Kontaktwechselwirkung keine Rolle.

Die Berechnung der Wechselwirkungsichte des p-Wellenbeitrags erfolgt analog. Für den direkten Term mit einer beliebigen Radialabhängigkeit gilt mit (A.20)

$$\begin{aligned}\mathcal{V}_1|_{\text{di}} &= \frac{1}{2V} \sum_{i,j} \langle ij | \mathbf{q}_r^{\dagger} v(\mathbf{r}) \mathbf{q}_r | ij \rangle = \frac{1}{2V} \sum_{\xi, \xi'} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}'}^{\kappa_{\xi}} \sum_{\vec{k}'}^{\kappa_{\xi'}} \langle \vec{k} \vec{k}' | \mathbf{q}_r^{\dagger} v(\mathbf{r}) \mathbf{q}_r | \vec{k} \vec{k}' \rangle \\ &= \frac{1}{720\pi^4} \left( \sum_{\xi} \kappa_{\xi}^8 + \sum_{\xi' > \xi} [\kappa_{\xi}^3 \kappa_{\xi'}^5 + \kappa_{\xi}^5 \kappa_{\xi'}^3] \right) \int d^3r v(r),\end{aligned}\quad (8.21)$$

für den Austauschterm mit (A.21)

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_1|_{\text{xc}} &= -\frac{1}{2V} \sum_{i,j} \langle ij | \mathbf{q}_r^\dagger v(\mathbf{r}) \mathbf{q}_r | ji \rangle = -\frac{1}{2V} \sum_{\xi, \xi'} \sum_{\vec{k}}^{\kappa_\xi} \sum_{\vec{k}'}^{\kappa_{\xi'}} \langle \vec{k} \vec{k}' | \mathbf{q}_r^\dagger v(\mathbf{r}) \mathbf{q}_r | \vec{k}' \vec{k} \rangle \\ &= -\frac{1}{720\pi^4} \sum_{\xi} \kappa_\xi^8 \int d^3r v(r) l_3(\kappa_\xi r), \end{aligned} \quad (8.22)$$

wobei  $l_3(x)$  eine weitere Hilfsfunktion, definiert durch

$$l_3(x) = 45 \left[ \left( \frac{j_0(x)}{x} \right)^2 + \left( \frac{21}{x^4} - \frac{1}{x^2} \right) j_1^2(x) - \frac{10}{x^3} j_0(x) j_1(x) \right], \quad (8.23)$$

bezeichnet. Spezialisierung der Radialabhängigkeit auf eine Kontaktwechselwirkung reduziert das Ortsintegral im direkten Term auf die Identität und im Austauschterm auf den Limes der Funktion  $l_3(x)$  für  $x \rightarrow 0$

$$\lim_{x \rightarrow 0} l_3(x) = -1. \quad (8.24)$$

Zusammengefaßt lautet die Wechselwirkungsichte für die p-Wellenkomponente der effektiven Kontaktwechselwirkung

$$\mathcal{V}_1^{\text{eff}} = \frac{g_1}{360\pi^4} \left( \sum_{\xi} \kappa_\xi^8 + \frac{1}{2} \sum_{\xi' > \xi} [\kappa_\xi^3 \kappa_{\xi'}^5 + \kappa_\xi^5 \kappa_{\xi'}^3] \right). \quad (8.25)$$

Im Gegensatz zum s-Wellenterm treten hier Wechselwirkungsbeiträge innerhalb einer Spezies — in Form des  $\kappa_\xi^8$ -Terms — und Beiträge zwischen den verschiedenen Spezies — in Form der gemischten Terme — auf. Damit ist für eine Kontaktwechselwirkung die p-Wellenkomponente der führende Wechselwirkungsterm, der innerhalb einer Spezies wirkt, und kann nicht vernachlässigt werden.

Damit ist die Energiedichte für das homogene Fermigas mit  $\Xi$  Teilchenspezies und Wechselwirkung vermittelt des s- und p-Wellenkontaktpotentials

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\text{hom}}(\kappa_1, \dots, \kappa_\Xi) &= \frac{1}{20\pi^2 m} \sum_{\xi} \kappa_\xi^5 \\ &+ \frac{a_0}{9\pi^3 m} \sum_{\xi' > \xi} \kappa_\xi^3 \kappa_{\xi'}^3 \\ &+ \frac{a_1^3}{30\pi^3 m} \left( \sum_{\xi} \kappa_\xi^8 + \frac{1}{2} \sum_{\xi' > \xi} [\kappa_\xi^3 \kappa_{\xi'}^5 + \kappa_\xi^5 \kappa_{\xi'}^3] \right), \end{aligned} \quad (8.26)$$

wobei die Wechselwirkungsparameter entsprechend (8.9) durch die Streulängen ausgedrückt werden. Statt des Fermiimpulses der einzelnen Spezies läßt sich die Energiedichte äquivalent in den Dichten  $\rho_\xi$  formulieren. Es gilt die allgemeine Relation (2.16) für jede einzelne Spezies

$$\rho_\xi = \frac{1}{6\pi^2} \kappa_\xi^3. \quad (8.27)$$

Die Energiedichte als Funktion der Dichten lautet damit

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\text{hom}}(\rho_1, \dots, \rho_{\Xi}) = & \frac{3(6\pi^2)^{2/3}}{10m} \sum_{\xi} \rho_{\xi}^{5/3} \\ & + \frac{4\pi a_0}{m} \sum_{\xi' > \xi} \rho_{\xi} \rho_{\xi'} \\ & + \frac{6\pi(6\pi^2)^{2/3} a_1^3}{5m} \left( \sum_{\xi} \rho_{\xi}^{8/3} + \frac{1}{2} \sum_{\xi' > \xi} [\rho_{\xi} \rho_{\xi'}^{5/3} + \rho_{\xi'} \rho_{\xi}^{5/3}] \right). \end{aligned} \quad (8.28)$$

Die folgenden Diskussionen beschränken sich auf die Darstellung der Energiedichte durch den Fermiimpuls der einzelnen Komponenten, da dann nur ganzzahlige Exponenten auftreten. Falls nötig können die Resultate jederzeit vermittle (8.27) auf die Dichten übertragen werden.

### 8.3 Grundzustand des inhomogenen Fermigases

Unter Verwendung der Energiedichte des homogenen Fermigases wird, dem Konzept der Thomas-Fermi-Näherung folgend, die Energiedichte des inhomogenen Fermigases in einem externen Potential abgeleitet. Auf Basis des Hohenberg-Kohn-Theorems läßt sich daraus durch Funktionalvariation die Grundzustandsdichte des inhomogenen Systems bestimmen. Formal führt die Funktionalvariation auf gekoppelte Polynomgleichungen für die lokalen Fermiimpulse der einzelnen Komponenten.

#### 8.3.1 Energiedichtefunktional in Thomas-Fermi-Näherung

Die Energiedichte des inhomogenen Systems setzt sich aus einer universellen Energiedichte  $\hat{\mathcal{E}}$  und einem Beitrag des externen Potentials  $\mathcal{U}$  zusammen. In Thomas-Fermi-Näherung ist die universelle Energiedichte des inhomogenen Systems lokal durch die Energiedichte des homogenen Systems gegeben

$$\hat{\mathcal{E}}[\kappa_1, \dots, \kappa_{\Xi}](\vec{x}) \stackrel{\text{TFN}}{=} \mathcal{E}_{\text{hom}}(\kappa_1(\vec{x}), \dots, \kappa_{\Xi}(\vec{x})). \quad (8.29)$$

Somit ergibt sich aus dem Ergebnis (8.26) des vorangehenden Abschnitts durch Ersetzung des Fermiimpulses  $\kappa_{\xi}$  durch den *lokalen Fermiimpuls*  $\kappa_{\xi}(\vec{x})$  die universelle Energiedichte des inhomogenen Systems in Thomas-Fermi-Näherung.

Der zweite Beitrag zur Energiedichte des inhomogenen Systems, die Energiedichte des externen Potentials, ist durch das Produkt von Dichte und externem Potential gegeben. Prinzipiell kann auf jede Teilchenspezies ein anderes externes Potential wirken, so daß die allgemeinste Form der Energiedichte des externen Feldes durch

$$\mathcal{U}[\kappa_1, \dots, \kappa_{\Xi}](\vec{x}) = \frac{1}{6\pi^2} \sum_{\xi} U_{\xi}(\vec{x}) \kappa_{\xi}^3(\vec{x}) \quad (8.30)$$

gegeben ist. Im folgenden wird das externe Feld durch ein sphärisch symmetrisches Oszillatorpotential der Form

$$U(\vec{x}) = \frac{m\omega^2}{2} x^2 = \frac{1}{2m\ell^4} x^2 \quad (8.31)$$



beschrieben. Hierbei bezeichnet  $\omega$  die Oszillatorfrequenz und  $\ell = 1/\sqrt{m\omega}$  die Oszillatorlänge, die als rms-Radius des freien Einteilchen-Grundzustandes des harmonischen Oszillators definiert ist. In Abschnitt 8.3.3 wird gezeigt, daß dieses sphärische Potential als Repräsentant einer ganzen Klasse deformierter Oszillatorpotentiale mit gleichem geometrischen Mittel der Oszillatorfrequenzen der drei Hauptachsen betrachtet werden kann. Für all diese Potentiale sind integrale Größen wie Energie und Teilchenzahl bei gegebener Wechselwirkung und chemischem Potential gleich, es bietet sich daher an, den technisch einfachsten Fall des sphärischen Potentials zu betrachten.

Damit ist das Energiedichtefunktional für inhomogene mehrkomponentige Gase in Thomas-Fermi-Näherung komplett. In der Darstellung durch die lokalen Fermiimpulse der einzelnen Komponenten gilt

$$\begin{aligned} \mathcal{E}[\kappa_1, \dots, \kappa_\Xi](\vec{x}) = & \frac{1}{6\pi^2} \sum_{\xi} U_{\xi}(\vec{x}) \kappa_{\xi}^3(\vec{x}) \\ & + \frac{1}{20\pi^2 m} \sum_{\xi} \kappa_{\xi}^5(\vec{x}) \\ & + \frac{a_0}{9\pi^3 m} \sum_{\xi' > \xi} \kappa_{\xi}^3(\vec{x}) \kappa_{\xi'}^3(\vec{x}) \\ & + \frac{a_1^3}{30\pi^3 m} \left( \sum_{\xi} \kappa_{\xi}^8(\vec{x}) + \frac{1}{2} \sum_{\xi' > \xi} [\kappa_{\xi}^3(\vec{x}) \kappa_{\xi'}^5(\vec{x}) + \kappa_{\xi}^5(\vec{x}) \kappa_{\xi'}^3(\vec{x})] \right). \end{aligned} \quad (8.32)$$

Ausgehend von dieser Energiedichte lassen sich alle Eigenschaften des Grundzustandes des wechselwirkenden Fermigas berechnen. Es ist zu bemerken, daß die Energiedichte proportional zu  $1/m$  ist, sofern das Fallenpotential durch die Oszillatorlänge entsprechend (8.31) parametrisiert wird. Es bietet sich an, Energien in Einheiten der inversen Masse anzugeben, so daß das Energiedichtefunktional und alle daraus abgeleiteten Größen nicht mehr explizit von der Masse abhängen. Ebenso läßt sich die explizite Abhängigkeit von der Oszillatorlänge  $\ell$  eliminieren, indem alle Längendimensionen in Einheiten der Oszillatorlänge  $\ell$  formuliert werden. Die generischen Eigenschaften des ultrakalten Fermigas hängen also nicht von der Masse der Atome oder der Oszillatorlänge ab, deren Absolutwerte skalieren lediglich die numerischen Werte von Energien und Längen. Die relevanten Parameter, die diese Systeme charakterisieren, sind nur die Teilchenzahl  $N_{\xi}$  bzw. das entsprechende chemische Potential  $\mu_{\xi}$  der einzelnen Spezies, sowie das Verhältnis von Streulängen und Oszillatorlänge  $a_0/\ell$  bzw.  $a_1/\ell$ .

### 8.3.2 Extremalbedingung und Grundzustandsdichte

Aus dem Hohenberg-Kohn-Theorem ergibt sich, daß der Grundzustand durch die Dichteverteilung beschrieben wird, die das exakte Energiefunktional bei gegebenen Teilchenzahlen minimiert. Entsprechend minimiert der Grundzustand in Thomas-Fermi-Näherung das Energiefunktional, das sich aus dem Integral über die Energiedichte (8.32) ergibt

$$E[\kappa_1, \dots, \kappa_{\Xi}] = \int d^3x \mathcal{E}[\kappa_1, \dots, \kappa_{\Xi}](\vec{x}). \quad (8.33)$$

Die Variation erfolgt unter der Nebenbedingung, daß das Integral über die Dichte  $\rho_\xi(\vec{x})$  jeder einzelnen Komponente der gegebenen Teilchenzahl  $N_\xi$  entspricht

$$N_\xi = \int d^3x \rho_\xi(\vec{x}) = \frac{1}{6\pi^2} \int d^3x \kappa_\xi^3(\vec{x}). \quad (8.34)$$

Diese Nebenbedingungen werden mittels Lagrangeparametern  $\mu_\xi$ , den sog. chemischen Potentialen der verschiedenen Komponenten, eingeführt. Zu minimieren ist das legendretransformierte Energiefunktional

$$\begin{aligned} F[\kappa_1, \dots, \kappa_\Xi] &= E[\kappa_1, \dots, \kappa_\Xi] - \sum_\xi \mu_\xi N_\xi \\ &= \int d^3x \mathcal{F}[\kappa_1, \dots, \kappa_\Xi](\vec{x}), \end{aligned} \quad (8.35)$$

wobei die entsprechende modifizierte Energiedichte  $\mathcal{F}$  durch

$$\mathcal{F}[\kappa_1, \dots, \kappa_\Xi](\vec{x}) = \mathcal{E}[\kappa_1, \dots, \kappa_\Xi](\vec{x}) - \sum_\xi \frac{\mu_\xi}{6\pi^2} \kappa_\xi^3(\vec{x}) \quad (8.36)$$

definiert ist. Eine notwendige jedoch nicht hinreichende Bedingung für ein Minimum der legendretransformierten Energie (8.35) ergibt sich aus der Forderung, daß die Variation des Integrals bezüglich aller lokalen Fermiimpulse verschwindet

$$\frac{\delta}{\delta \kappa_\xi} F[\kappa_1, \dots, \kappa_\Xi] = 0 \quad \text{für alle } \xi. \quad (8.37)$$

Daraus folgt unmittelbar eine Bedingung an die Ableitungen des Integranden, d.h. der legendretransformierten Energiedichte  $\mathcal{F}$ , nach dem Fermiimpuls an einem gegebenen Ort  $\vec{x}$

$$\frac{\partial}{\partial \kappa_\xi(\vec{x})} \mathcal{F}[\kappa_1, \dots, \kappa_\Xi](\vec{x}) = 0 \quad \text{für alle } \xi \text{ und } \vec{x}. \quad (8.38)$$

Diese *Extremalbedingung* wird notwendig von den lokalen Fermiimpulsen des Grundzustandes für alle Orte  $\vec{x}$  erfüllt. Sie ist jedoch nicht hinreichend für ein Energieminimum, denn sie wird auch von einem Energiemaximum, dem im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie keine physikalische Bedeutung zukommt, oder einem Sattelpunkt erfüllt.

Die Extremalbedingung (8.38) läßt sich durch Einsetzen der Thomas-Fermi-Energiedichte (8.32) explizit auswerten. Es ergibt sich ein System von  $\Xi$  gekoppelten Polynomgleichungen für die lokalen Fermiimpulse jeder einzelnen Spezies  $\xi$ , die punktweise zu lösen sind

$$\begin{aligned} m[\mu_\xi - U_\xi(\vec{x})] &= \frac{1}{2} \kappa_\xi^2(\vec{x}) \\ &+ \frac{2a_0}{3\pi} \sum_{\xi' \neq \xi} \kappa_{\xi'}^3(\vec{x}) \\ &+ \frac{8a_1^3}{15\pi} \kappa_\xi^5(\vec{x}) + \frac{a_1^3}{30\pi} \sum_{\xi' \neq \xi} [3\kappa_{\xi'}^5(\vec{x}) + 5\kappa_\xi^2(\vec{x}) \kappa_{\xi'}^3(\vec{x})]. \end{aligned} \quad (8.39)$$

Die trivialen Lösungen  $\kappa_\xi(\vec{x}) = 0$  sind in dieser Form bereits abgespalten.

Die Extremalbedingung (8.39) bildet die Grundlage für alle weiteren Untersuchungen. Für gegebenes  $\vec{x}$  stellt sie ein gekoppeltes Gleichungssystem fünften Grades dar, dessen Lösungen die lokalen Fermiimpulse der einzelnen Komponenten am Ort  $\vec{x}$  sind. Daraus ergibt sich die räumliche Verteilung der lokalen Fermiimpulse, die ein Extremum des Energiefunktional (8.33) unter der Nebenbedingung fester Teilchenzahl liefern.

Formal besitzt ein System von  $\Xi$  gekoppelten Polynomgleichungen 5. Grades,  $5^\Xi$  Lösungen, d.h. es existieren  $5^\Xi$  Sätze von Fermiimpulsen  $\{\kappa_1(\vec{x}), \dots, \kappa_\Xi(\vec{x})\}$ , die der Extremalbedingung genügen. Da der Fermiimpuls entsprechend seiner physikalischen Bedeutung immer reell und positiv sein muß, sind nur die Sätze physikalisch sinnvoll, die *reell und positiv* sind. Darüber hinaus ist zu prüfen, ob die Lösung der Extremalbedingung (8.39) wirklich ein Minimum beschreibt, oder ob es sich um ein Maximum oder einen Sattelpunkt handelt. Damit schränkt sich die Menge der Lösungen stark ein.

Die genaue Struktur der Lösungen dieser Extremalbedingung wird für die experimentell bedeutenden Fälle des ein- und zweikomponentigen Fermigases in Kapitel 9 ausführlich diskutiert. Es wird sich zeigen, daß maximal eine physikalische Lösung der Extremalbedingung existiert. Für gewisse Werte der s- und p-Wellenstretulängen sowie des chemischen Potentials kommt es sogar vor, daß überhaupt keine Lösung existiert.

### 8.3.3 Deformierte Fallenpotentiale

Die Mehrzahl der experimentell realisierten Fallen läßt sich in guter Näherung durch ein deformiertes harmonisches Oszillatorpotential beschreiben

$$U(\vec{x}) = \frac{m}{2} (\omega_1^2 x_1^2 + \omega_2^2 x_2^2 + \omega_3^2 x_3^2) = \frac{m\bar{\omega}^2}{2} (\lambda_1^2 x_1^2 + \lambda_2^2 x_2^2 + \lambda_3^2 x_3^2). \quad (8.40)$$

Die  $\omega_i$  bezeichnen die den drei Hauptachsen zugeordneten Oszillatorfrequenzen. Division durch das geometrische Mittel der Oszillatorfrequenzen  $\bar{\omega} = \sqrt[3]{\omega_1\omega_2\omega_3}$  führt auf die reduzierten Oszillatorfrequenzen  $\lambda_i = \omega_i/\bar{\omega}$ , für die per Constructionem  $\lambda_1\lambda_2\lambda_3 = 1$  gilt. Sphärische Potentiale, wie sie den folgenden Rechnungen zugrundegelegt werden, werden experimentell eher selten realisiert. Es ist dennoch legitim von diesem numerisch einfacheren Fall auszugehen, da jedes sphärische Potential mit bestimmter Oszillatorlänge als Repräsentant einer ganzen Klasse deformierter Potentiale betrachtet werden kann. Diese Klasse ist durch gleiches geometrisches Mittel  $\bar{\omega}$  der Oszillatorfrequenzen gekennzeichnet. Innerhalb einer Klasse sind integrale Größen, wie Energie und Teilchenzahl, bei gegebenen Wechselwirkungsstärken und gegebenem chemischen Potential gleich.

Dies läßt sich auf rein formalem Niveau beweisen, wobei man sich o.B.d.A. auf ein einkomponentiges System beschränkt. Der lokale Fermiimpuls des Grundzustandes erfüllt notwendigerweise an jedem Ort  $\vec{x}$  die Extremalbedingung (8.39). Diese Gleichung verknüpft den lokalen Fermiimpuls eindeutig mit dem Wert des externen Potentials am gleichen Ort. Es existiert daher eine Funktion  $\tilde{\kappa}(U)$ , in die das chemische Potential und die Wechselwirkungsstärken eingehen, sodaß gilt:

$$\kappa(\vec{x}) = \tilde{\kappa}(U(\vec{x})). \quad (8.41)$$

Damit sind alle Größen, die ein Funktional der lokalen Fermiimpulse sind, z.B. Teilchenzahl und Energie, als reines Funktional des äußeren Potentials darstellbar. Insbesondere

gilt für die Energie

$$E = \int d^3x \tilde{\mathcal{E}}(U(\vec{x})). \quad (8.42)$$

Die Ortsabhängigkeit des Integranden wird allein vor der Ortsabhängigkeit des externen Potentials bestimmt. Daher läßt sich eine Koordinatentransformation durchführen, die das deformierte Oszillatorpotential  $U(\vec{x})$  in ein sphärisch symmetrisches Potential  $U'(\vec{x}')$  in transformierten Koordinaten  $x_i \rightarrow x'_i = \lambda_i x_i$  überführt

$$U(x_1, x_2, x_3) \rightarrow U'(x'_1, x'_2, x'_3) = U(x'_1/\lambda_1, x'_2/\lambda_2, x'_3/\lambda_3). \quad (8.43)$$

Die entsprechende Substitution der Integrationsvariablen im Energieintegral führt auf die Relation

$$E = \int d^3x \tilde{\mathcal{E}}(U(\vec{x})) = \frac{1}{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} \int d^3x' \tilde{\mathcal{E}}(U'(\vec{x}')). \quad (8.44)$$

Das erste Integral ergibt die Energie des Systems im ursprünglichen deformierten Oszillatorpotential, während das zweite Integral die Energie in einem sphärischen Potential  $U'(\vec{x}')$  beschreibt. Da allgemein  $\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 = 1$  gilt, sind beide Energien gleich. Damit ist gezeigt, daß die Energie eines Vielteilchensystems in Thomas-Fermi-Näherung in einem sphärischen Oszillator gleich der in einem deformierten Oszillator ist, wenn die mittleren Oszillatorlängen  $\bar{\omega}$  beider Potentiale gleich sind. Entsprechendes gilt für andere Observablen, die durch Integrale über die lokalen Fermiimpulse bestimmt sind, z.B. für die Teilchenzahl. Im Umkehrschluß folgt, daß bei gegebener Teilchenzahl das chemische Potential und der maximale Fermiimpuls bzw. die maximale Dichte ebenfalls gleich sind. Zusammengefaßt: *In Thomas-Fermi-Näherung sind Energie, Teilchenzahl und maximaler Fermiimpuls bzw. maximale Dichte bei gegebenen Wechselwirkungsstärken und chemischem Potential für alle Oszillatorpotentiale mit gleicher mittlerer Oszillatorfrequenz  $\bar{\omega}$  gleich.* Die Gleichheit der mittleren Oszillatorfrequenzen kann auch als Volumengleichheit aller Äquipotentialellipsoide veranschaulicht werden.

Dieser einfache Zusammenhang gilt nur in Thomas-Fermi-Näherung. Bereits die Hinzunahme der nächsten Ordnung der Gradientenentwicklung führt dazu, daß die Energiedichte nicht mehr als lokale Funktion des äußeren Potentials (8.41) dargestellt werden kann. Das gilt für jeden über eine Lokale-Dichte-Näherung hinausgehenden Ansatz. Vorsicht ist auch bezüglich stark deformierter Potentiale geboten: Grundlage für die Anwendbarkeit des Skalierungsverhaltens ist die Gültigkeit der Thomas-Fermi-Näherung. Daher ist es nicht möglich, extrem deformierte Potentiale, die zu quasi-zweidimensionalen oder quasi-eindimensionalen Systemen führen, mittels Skalierung auf ein dreidimensionales sphärisches Potential abzubilden.

Die Untersuchungen des folgenden Kapitels machen von diesem Skalierungsverhalten der relevanten Größen insofern Gebrauch, als daß alle Rechnungen, sofern die Form des externen Feldes eine Rolle spielt, für sphärisch symmetrische Oszillatorpotentiale ausgeführt werden. Die Ergebnisse lassen sich schließlich auf deformierte Oszillatorpotentiale mit gleicher mittlerer Oszillatorfrequenz  $\bar{\omega} = \sqrt[3]{\omega_1 \omega_2 \omega_3}$  bzw. gleicher mittlerer Oszillatorlänge  $\bar{\ell} = \sqrt[3]{\ell_1 \ell_2 \ell_3}$  übertragen.

### 8.3.4 Erweiterte Thomas-Fermi-Näherung

Wie im einleitenden Abschnitt 8.1.2 diskutiert wurde, kann die Thomas-Fermi-Näherung als nullte Ordnung einer systematischen Entwicklung der semiklassischen Energiedichte verstanden werden. Dabei wird angenommen, daß alle Terme, die Gradienten

der Dichte enthalten, klein gegenüber den Termen sind, in die nur der lokale Wert der Dichte eingeht. Diese Annahme ist an der Oberfläche des inhomogenen Systems nicht gerechtfertigt, da die Dichte hier zwangsläufig große Gradienten und gleichzeitig kleine Absolutwerte aufweist.

Um die Qualität der Thomas-Fermi-Näherung zu quantifizieren, muß der nächste Term der Gradientenentwicklung betrachtet werden. Der Einfachheit halber wird hier nur die Gradientenkorrektur der kinetischen Energiedichten untersucht. Entsprechend Gleichung (8.6) [GrVo79, BrGu85] lautet der erste über die Thomas-Fermi-Näherung hinausgehende Term der Gradientenentwicklung für ein einkomponentiges Fermigas

$$\mathcal{T}_\nabla = \frac{1}{72m} \frac{|\vec{\nabla}\rho(\vec{x})|^2}{\rho(\vec{x})} = \frac{1}{48\pi^2m} \kappa(\vec{x}) |\vec{\nabla}\kappa(\vec{x})|^2. \quad (8.45)$$

In der Kernphysik ist dieser Beitrag als Weizsäcker-Term bekannt, der Vorfaktor wird gelegentlich modifiziert, um spezielle Oberflächeneigenschaften in einem effektiven Sinne zu berücksichtigen. Der Laplaceterm in Gleichung (8.6) trägt nicht zur integrierten kinetischen Energie bei und kann daher weggelassen werden.

Die Summe der Thomas-Fermi-Energiedichte (8.32) und der *Gradientenkorrektur* (8.45) definiert das Energiedichtefunktional der *erweiterten Thomas-Fermi-Näherung*. Im Prinzip kann die gesamte Untersuchung auf diesem erweiterten Energiefunktional aufgebaut werden. Zur Bestimmung der Grundzustandsdichten ist dann allerdings ein gekoppeltes System von nichtlinearen Differentialgleichungen zu lösen.

Um den Einfluß der Gradientenkorrektur bzw. die Qualität der Thomas-Fermi-Näherung zu quantifizieren, ist es ausreichend, die Gradientenkorrektur im Sinne einer Störungsrechnung niedrigster Ordnung zu berücksichtigen. Die Gradientenkorrektur zur Energie wird durch Integration von (8.45) mit den in Thomas-Fermi-Näherung berechneten lokalen Fermiimpulsen bestimmt. Im Abschnitt B.2.3 des Anhangs wird diese Rechnung für das freie Fermigas analytisch durchgeführt. Es zeigt sich, daß die Thomas-Fermi-Näherung bereits ohne Berücksichtigung der Gradiententerme für die zu untersuchenden Teilchenzahlen eine ausgezeichnete Näherung darstellt.

## Kapitel 9

---

# *Ultrakalte verdünnte Fermigase in externen Potentialen*

In diesem Kapitel werden im Rahmen der Thomas-Fermi-Näherung die Effekte der Atom-Atom-Wechselwirkung auf Grundzustandseigenschaften der verdünnten ultrakalten inhomogenen Fermigase untersucht. Das Hauptaugenmerk richtet sich auf die Rolle der p-Wellenwechselwirkung und ihren Einfluß auf die Struktur und Stabilität der ein- und zweikomponentigen Fermigase. Im Zusammenspiel mit der s-Wellenwechselwirkung ergeben sich im zweikomponentigen System eine Reihe neuartiger Effekte, die von großer experimenteller Bedeutung sein könnten.

### *9.1 Einkomponentige Fermigase: Grundlagen*

Als einfachstes nichttriviales System sei ein einkomponentiges wechselwirkendes Fermigas in einem externen Potential betrachtet. Alle Teilchen sind im quantenmechanischen Sinne ununterscheidbar und wegen des fermionischen Charakters durch einen antisymmetrischen Vielteilchenzustand zu beschreiben. Das hat unmittelbar zur Folge, daß die effektive s-Wellenwechselwirkung in einem einkomponentigen System keinen Beitrag zum Energiefunktional liefert, nur die p-Wellenwechselwirkung hat einen Einfluß auf die Struktur des Systems.

#### *9.1.1 Thomas-Fermi-Energiedichte*

Ausgangspunkt für die Untersuchung des ein- bzw. zweikomponentigen Fermigases ist ein Hamiltonoperator, bestehend aus kinetischer Energie, externem Fallenpotential und s- und p-Wellenkomponente der effektiven Kontaktwechselwirkung. Daraus läßt sich, der Diskussion in den Abschnitten 8.2 und 8.3 folgend, das Energiedichtefunktional in Thomas-Fermi-Näherung ableiten. Für ein einkomponentiges Fermigas ergibt sich aus (8.32) die Energiedichte

$$\mathcal{E}[\kappa](\vec{x}) = \frac{1}{6\pi^2} U(\vec{x}) \kappa^3(\vec{x}) + \frac{1}{20\pi^2 m} \kappa^5(\vec{x}) + \frac{a_1^3}{30\pi^3 m} \kappa^8(\vec{x}). \quad (9.1)$$

In diesem Kapitel werden die Energiedichte und die daraus abgeleiteten Beziehungen zugunsten der Übersicht in den lokalen Fermiimpulsen  $\kappa(\vec{x})$  dargestellt, eine Umformu-

lierung auf eine Abhängigkeit von der Dichte  $\rho(\vec{x}) = \frac{1}{6\pi^2}\kappa^3(\vec{x})$  ist jederzeit möglich.

Wie bereits betont, trägt im Falle des einkomponentigen Fermigases der s-Wellenterm der Kontaktwechselwirkung aufgrund des Pauliprinzips nicht bei. Damit ist der p-Wellenterm die niedrigste beitragende Ordnung der Atom-Atom-Wechselwirkung. Soll der Einfluß der Wechselwirkung, also Effekte jenseits des freien Fermigases, studiert werden, so ist der p-Wellenbeitrag der effektiven Kontaktwechselwirkung zwingend zu berücksichtigen. In gleicher Ordnung wie dieser p-Wellenbeitrag ist auch ein möglicher Effektive-Reichweite-Term der s-Wellenwechselwirkung zu erwarten. Er wurde zwar in der Streulängeformulierung der effektiven Kontaktwechselwirkung nicht berücksichtigt, kann jedoch ohne weiteres ergänzt werden. Das führt zu einer Modifikation des  $\kappa^8$ -Terms, die in Form einer effektiven p-Wellenstreulänge berücksichtigt werden kann. Da die effektive Reichweite jedoch stets in der Größenordnung der Potentialreichweite liegt, kann diese Korrektur gegenüber der p-Wellenstreulänge, die in den interessanten Fällen sehr viel größer als die Potentialreichweite ist, vernachlässigt werden.

Die Grundzustandsdichte in Thomas-Fermi-Näherung ergibt sich durch Minimierung des Energiefunktionals bei Variation des lokalen Fermiimpulses  $\kappa(\vec{x})$  unter der Nebenbedingung konstanter Teilchenzahl  $N$ . Die Nebenbedingung läßt sich durch Einführung des chemischen Potentials  $\mu$  als Lagrangeparameter und Minimierung des transformierten Energiefunktionals

$$F[\kappa] = \int d^3x \mathcal{F}[\kappa](\vec{x}) = \int d^3x \left( \mathcal{E}[\kappa](\vec{x}) - \frac{\mu}{6\pi^2} \kappa^3(\vec{x}) \right) \quad (9.2)$$

berücksichtigen. Die Variation dieses Integrals verschwindet, wenn die Ableitung des Integranden nach dem lokalen Fermiimpuls verschwindet. Das Variationsproblem reduziert sich somit auf eine algebraische Extremalbedingung (8.39), die für das einkomponentige Fermigas die Form

$$m[\mu - U(\vec{x})] = \frac{1}{2} \kappa^2(\vec{x}) + \frac{8a_1^3}{15\pi} \kappa^5(\vec{x}) \quad (9.3)$$

annimmt. Diese Extremalbedingung ist von dem lokalen Fermiimpuls des Grundzustandes punktweise für alle  $\vec{x}$  zu erfüllen, dabei sind triviale Lösungen  $\kappa(\vec{x}) = 0$  bereits separiert.

Was läßt sich anhand dieser Gleichung über die allgemeine Struktur der Lösung aussagen? Die Aufgabe besteht in der Bestimmung der positiven reellen Nullstellen eines Polynoms von fünftem Grade mit reellen Koeffizienten. Allgemein existieren 5 Nullstellen von denen eine ungerade Zahl, also mindestens eine, reell ist (siehe Abschnitt 8.3.2). Die Zahl der reellen *und* positiven Nullstellen ergibt sich aus der Descarteschen Zeichenregel [BrSm89]: Sie ist gleich oder um eine gerade Zahl kleiner als die Zahl der Vorzeichenwechsel der Koeffizientenfolge des Polynoms. Hieraus ergeben sich unmittelbar zwei zu unterscheidende Fälle: positive und negative p-Wellenstreulänge.

Im Falle positiver Streulänge  $a_1$  hat die Koeffizientenfolge einen Vorzeichenwechsel und damit genau eine positive reelle Nullstelle innerhalb des klassisch erlaubten Bereiches  $\mu > U(\vec{x})$ . Demnach existiert für effektiv abstoßende Wechselwirkungen genau eine physikalische Lösung für den lokalen Fermiimpuls des Grundzustandes in Thomas-Fermi-Näherung. Jenseits des klassischen Umkehrpunktes hat die Extremalbedingung (9.3) keine positive reelle Lösung, so daß die Grundzustandsdichte entsprechend der trivialen Lösung identisch Null ist.

Der Fall negativer Streulängen ist weniger eindeutig. Hier besitzt die Koeffizientenfolge innerhalb des klassisch erlaubten Bereichs zwei Vorzeichenwechsel, d.h. zwei oder



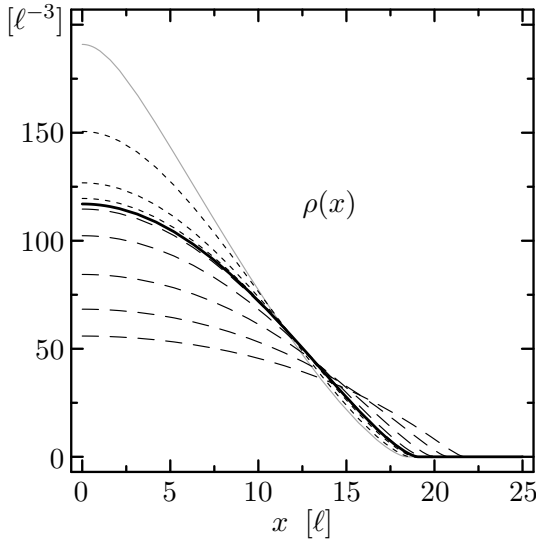


Abbildung 9.1 · Grundzustandsdichten in Thomas-Fermi-Näherung für das einkomponentige Fermigas mit  $N = 10^6$  Teilchen in einer sphärischen Falle mit Oszillatorlänge  $\ell$ . Die verschiedenen Kurven zeigen die wechselwirkungsfreie Lösung (—), Lösungen zu effektiv abstoßenden p-Wellenwechselwirkungen mit  $a_1/\ell = 0.02, 0.04, 0.06, 0.08, 0.1$  (---) und solche zu anziehenden Wechselwirkungen mit  $a_1/\ell = -0.02, -0.03, -0.04$  (-----). Jenseits von  $a_1/\ell = -0.044$  (—) existiert keine Lösung der Extremalbedingung mehr.

keine positive reelle Lösungen. Da die Bedingung (9.3) lediglich notwendig aber nicht hinreichend für ein Minimum der legendretransformierten Energiedichte  $\mathcal{F}[\kappa](\vec{x})$  ist, beschreibt in Fällen mit zwei positiven reellen Nullstellen tatsächlich nur eine der beiden ein Minimum von  $\mathcal{F}[\kappa](\vec{x})$ . Die zweite Lösung entspricht einem Maximum, das für die Beschreibung des Grundzustandes im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie keine Bedeutung hat. Folglich existiert für anziehende Wechselwirkungen *maximal* eine physikalische Lösung im klassisch erlaubten Bereich. Wenn keine physikalische Lösung existiert, bedeutet dies, daß kein metastabiler Zustand des Fermigases mit niedriger Dichte auftritt. Dieser Fall wird später im Detail diskutiert.

In den folgenden Abschnitten werden die physikalischen Eigenschaften der Thomas-Fermi-Grundzustände, insbesondere der Dichten und Energien, in Abhängigkeit von den relevanten Parametern, d.h. der p-Wellenstreuulänge, der Teilchenzahl und des Achsenverhältnisses der Falle, diskutiert.

### 9.1.2 Effekt der p-Wellenwechselwirkung

Im ersten Schritt soll der Effekt der Atom-Atom-Wechselwirkung, die hier in Gestalt der effektiven p-Wellen-Kontaktwechselwirkung auftritt, untersucht werden. Es bietet sich an, die relevanten Größen, wie Dichten, Energien und Radien als Funktion des einzigen Wechselwirkungsparameters, dem Verhältnis von p-Wellenstreuulänge und Oszillatorlänge  $a_1/\ell$ , zu betrachten. Dazu wird die Extremalbedingung (9.3) in einem ersten Schritt für gegebenes chemisches Potential punktweise numerisch gelöst. Es resultiert eine diskrete Repräsentation des Dichteprofiles für den Grundzustand auf einem räumlichen Gitter. In einem zweiten Schritt können daraus durch numerische Integration Teilchenzahl, Energie und rms-Radius bestimmt werden.

Die Abbildung 9.1 zeigt die Grundzustandsdichten eines einkomponentigen Fermigases mit  $N = 10^6$  Teilchen in einem sphärisch symmetrischen Oszillatorpotential mit Oszillatorlänge  $\ell$  zu verschiedenen Werten von  $a_1/\ell$ . Experimentell kann auf dieses Verhältnis durch Modifikation des Fallenpotentials oder durch Abstimmung der Streulänge Einfluß genommen werden. Um einen Eindruck von den Größenordnungen zu geben: Ein Wechselwirkungsparameter  $a_1/\ell = 0.1$  entspricht bei derzeit typischen Fal-



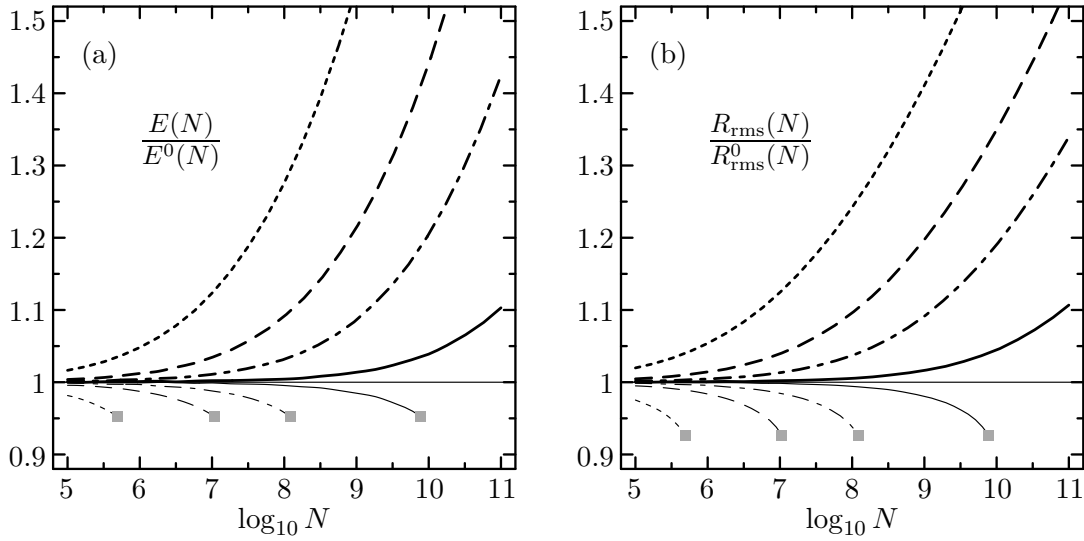


Abbildung 9.2 · Energie (a) und rms-Radius (b) des einkomponentigen Fermigases in Thomas-Fermi-Näherung als Funktion des Logarithmus der Teilchenzahl für verschiedene p-Wellenwechselwirkungen. Beide Größen sind in Einheiten der wechselwirkungsfreien Größen zur entsprechenden Teilchenzahl aufgetragen. Dick gezeichnete Kurven entsprechen abstoßenden, dünne anziehenden Wechselwirkungen, die Beträge der Streulängen sind im einzelnen  $|a_1|/\ell = 0.01$  (—),  $0.02$  (— · — · —),  $0.03$  (— — —) und  $0.05$  (·····). Die grauen Quadrate markieren die kritische Teilchenzahl jenseits derer kein metastabiler Zustand existiert.

lenkonfigurationen mit  $\ell \approx 1\mu\text{m}$  einer Streulänge von  $a_1 \approx 1900a_B$  oder bei typischen Streulängen von  $a_1 \approx 100a_B$  einer Oszillatorlänge von  $\ell \approx 0.05\mu\text{m}$ . Hier bezeichnet  $a_B = 0.53\text{\AA} = 0.53 \times 10^{-4}\mu\text{m}$  den sog. Bohrradius.

Die Abbildung macht deutlich, daß die Form des Dichteprofiles des einkomponentigen Fermigases deutlich von der p-Wellenwechselwirkung beeinflusst wird: Mit wachsender Streulänge sinkt die zentrale Dichte stark ab und die Ausdehnung des Systems wächst entsprechend. Dieses Verhalten läßt sich anhand der Energiedichte (9.1) leicht verstehen. Der Term der p-Wellenwechselwirkung geht proportional zu  $\kappa^8$  bzw.  $\rho^{8/3}$  ein und ist der dominante Energiebeitrag bei großen Dichten. Für positive p-Wellenstreulängen und damit positive Koeffizienten vor dem Wechselwirkungsterm der Energiedichte tendiert das System im Sinne der Energieminimierung dazu, die Dichte lokal klein zu halten um große Wechselwirkungsbeiträge zu vermeiden. Das führt zur zunehmenden Abflachung der Dichteverteilung und einem entsprechend vergrößerten Radius. Dem wirkt der Beitrag des externen Potentials entgegen, der mit zunehmender Ausdehnung des Systems anwächst. Der energieoptimale Zustand stellt also einen Kompromiß zwischen Wechselwirkungsenergie, die ausgedehnte Dichteverteilungen bevorzugt, und Energiebeitrag des Fallenpotentials, der kompakte Dichteprofile begünstigt, dar.

Im Falle anziehender p-Wellenwechselwirkungen, d.h. negativer Streulängen, erzeugen große lokale Dichten große negative Wechselwirkungsbeiträge. Das System neigt zur Ausbildung hoher Dichten im Fallenzentrum, wie die Abbildung demonstriert. Dem wirkt der Beitrag der kinetischen Energie entgegen, der einen positiven, zu  $\kappa^5$  proportionalen Beitrag zur Energie liefert. Die lokale Dichte wird durch ein Gleichgewicht zwischen Wechselwirkungsenergie, die hohe Dichten und kompakte Verteilungen bevorzugt, und kinetischer Energie, die niedrige Dichten begünstigt, bestimmt. Überschreitet

der Betrag der Streulänge für anziehende p-Wellenwechselwirkungen einen Grenzwert, dann kann der kinetische Term den Wechselwirkungsterm bei gegebener Teilchenzahl nicht mehr kompensieren und das System kollabiert formal in einen Zustand mit unendlicher Dichte. Diese Grenze für die Stabilität des Fermigases in Gegenwart anziehender Wechselwirkungen wird in Abschnitt 9.2 im Detail diskutiert.

Zum Abschluß ist in Abbildung 9.2 die Abhängigkeit der Energie und des rms-Radius für das einkomponentige Fermigas von der Teilchenzahl und der Wechselwirkungsstärke dargestellt. Die Berechnung erfolgt durch Integration der Dichte bzw. Energiedichte unter Verwendung der numerischen Lösung der Extremalbedingung (9.3). Die verschiedenen Kurven entsprechen verschiedenen positiven und negativen p-Wellenstreulängen und sind jeweils auf die Energie bzw. den rms-Radius des nichtwechselwirkenden Systems gleicher Teilchenzahl bezogen.

Der Einfluß der p-Wellenwechselwirkung sowohl auf die Energie als auch auf den rms-Radius wächst sehr stark mit der Teilchenzahl und mit dem Betrag der p-Wellenstreulänge an. Während für Systeme mit schwachen Wechselwirkungen ( $|a_1|/\ell \approx 0.01$ ) bis zu hohen Teilchenzahlen ( $N \approx 10^9$ ) praktisch keine Abweichung von den freien Observablen zu beobachten ist, treten bei Wechselwirkungsparametern  $|a_1|/\ell$ , die um lediglich einen Faktor fünf größer sind, schon bei kleinen Teilchenzahlen signifikante Abweichungen von der freien Lösung auf.

Besonders interessant sind die Fälle mit anziehender p-Wellenwechselwirkung. Wie bereits diskutiert existiert bei gegebener negativer Streulänge eine maximale Teilchenzahl für das metastabile Fermigas, die mit wachsendem Betrag der Streulänge sinkt. Die Abbildung zeigt, daß der Kollaps unabhängig von der Stärke der Wechselwirkung und der Teilchenzahl bei festen Werten der Energie und des rms-Radius auftritt: Für die Energie bei  $E(N)/E^0(N) \approx 0.953$  und für den Radius bei  $R_{\text{rms}}(N)/R_{\text{rms}}^0(N) \approx 0.926$ . Einkomponentige Fermigase mit kleineren Werten dieser beiden Verhältnisse sind nicht stabil.

## 9.2 Einkomponentige Fermigase: Stabilität

Ein zentraler Punkt der hier angestellten Untersuchungen ist die Stabilität des Fermigases in Gegenwart anziehender Wechselwirkungen. Bereits bei der Diskussion der mathematischen Eigenschaften der Extremalbedingung (9.3) wurde festgestellt, daß es für negative p-Wellenstreulängen nicht in jedem Fall eine Lösung gibt. Die physikalische Konsequenz ist, daß der metastabile Zustand, in dem das verdünnte ultrakalte Fermigas im externen Potential präpariert werden soll, nicht für alle Wechselwirkungsstärken und Teilchenzahlen existiert. Wie bereits im vorangehenden Abschnitt gezeigt, gibt es eine gewisse maximale Teilchenzahl bzw. eine maximale Wechselwirkungsstärke, bis zu der dieser metastabile Zustand existiert. Jenseits dieser Grenze tritt nur noch der stabile Grundzustand — ein Tröpfchen oder Kristall hoher Dichte — auf, dessen Struktur mit der hier verwendeten Kontaktwechselwirkung nicht beschrieben werden kann. Hier sollen explizite Bedingungen für die Existenz des metastabilen Zustandes in Abhängigkeit von Streulänge und lokalem Fermiimpuls bzw. Teilchenzahl abgeleitet werden.

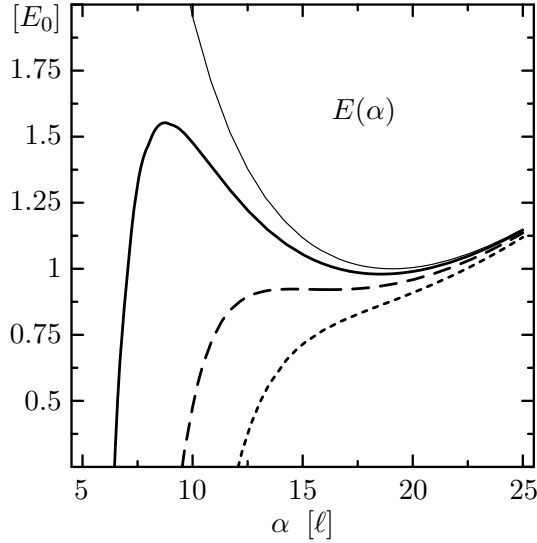


Abbildung 9.3 · Energie als Funktion des Radiusparameters  $\alpha$  der Parametrisierung des lokalen Fermiimpulses (9.4) für ein einkomponentiges Fermigas mit  $N = 10^6$  Teilchen. Die Kurven beschreiben das freie System (—) und die wechselwirkenden Systeme mit p-Wellenstreu­längen  $a_1/\ell = -0.035$  (—),  $-0.051$  (---) und  $-0.065$  (.....). Die Energien sind auf die Grundzustandsenergie des freien Systems normiert.

### 9.2.1 Illustration im Rahmen eines Variationsmodells

Zur Illustration der Instabilität des einkomponentigen Fermigases in Folge anziehender p-Wellenwechselwirkungen ist ein einfaches Variationsmodell sehr nützlich. Dazu wird der lokale Fermiimpuls durch eine einfache Parametrisierung dargestellt, die sich an der analytischen Form der freien Lösung orientiert

$$\kappa(x) = \frac{2\sqrt[3]{6N}}{\alpha} \sqrt{1 - \left(\frac{x}{\alpha}\right)^2} \quad \text{für } x \leq \alpha. \quad (9.4)$$

Der Variationsparameter  $\alpha$  entspricht dem klassischen Umkehrpunkt, jenseits dessen der lokale Fermiimpuls in Thomas-Fermi-Näherung identisch verschwindet. Durch Einsetzen der Parametrisierung in die Energiedichte (9.1) und Integration bis zum klassischen Umkehrpunkt erhält man die analytische Form der Energie als Funktion von  $\alpha$ ,  $a_1$ ,  $\ell$  und  $N$ :

$$E(\alpha, \ell, a_1, N) = C_u \frac{N \alpha^2}{\ell^4} + C_t \frac{N^{5/3}}{\alpha^2} + C_1 \frac{N^{8/3} a_1^3}{\alpha^5} \quad (9.5)$$

mit

$$C_u = \frac{3}{16m}, \quad C_t = \frac{3\sqrt[3]{9/2}}{2m}, \quad C_1 = \frac{262144\sqrt[3]{4/3}}{1925\pi^2 m}. \quad (9.6)$$

Der erste Summand stammt vom Beitrag des externen Potentials und wächst proportional zu  $\alpha^2$ ; zusammen mit dem positiven Koeffizienten bewirkt dies ein Ansteigen der Energie mit wachsendem Radius der Dichteverteilung. Der zweite Term repräsentiert die kinetische Energie und fällt mit  $\alpha^{-2}$  ab, d.h. sein Beitrag fällt mit wachsendem Radius. Im wechselwirkungsfreien Fall bestimmt das Gleichgewicht zwischen diesen beiden Termen den Grundzustandsradius. In Gegenwart einer anziehenden Wechselwirkung mit negativer Streulänge liefert der letzte Term einen negativen Beitrag, dessen Betrag mit  $\alpha^{-5}$  zu kleinen Radien hin ansteigt. Bei hinreichend kleinem  $\alpha$  dominiert dieser Beitrag über den positiven Beitrag der kinetischen Energie und führt zu negativen Energien. Im Grenzübergang  $\alpha \rightarrow 0$  divergiert die Energie sogar gegen  $-\infty$ . Dies ist jedoch eine

Pathologie des effektiven Kontaktpotentials, das dann nicht mehr anwendbar ist. Physikalisch bildet sich bei sehr kleinen Radien der absolute Grundzustand des Systems — das Tröpfchen hoher Dichte.

In Abbildung 9.3 ist die detaillierte Abhängigkeit der Energie von  $\alpha$  für ein System aus  $N = 10^6$  Teilchen bei verschiedenen p-Wellenstreu­längen gezeigt. Wie bereits diskutiert, existiert im wechselwirkungsfreien Fall nur ein Minimum bei positiven Energien. Sobald eine schwache attraktive Wechselwirkung einbezogen wird, zeigt sich ein absolutes Minimum bei extrem kleinen Radien. Das Minimum bei Radien von der Größenordnung der Oszillatorlänge ist nur noch lokal, der damit assoziierte Zustand des verdünnten Fermigases ist somit metastabil. Erhöht sich die Wechselwirkungsstärke  $|a_1|$ , dann wird dieses Minimum zusehends flacher und geht bei einer kritischen Wechselwirkungsstärke in einen Sattelpunkt über. Für Wechselwirkungen jenseits dieser kritischen Stärke existiert das lokale Minimum — d.h. der metastabile Zustand des verdünnten Gases — nicht mehr.

### 9.2.2 Stabilitätsbedingungen

Eine geschlossene Form der *Stabilitätsbedingung* des einkomponentigen Fermigases, d.h. der Existenzbedingung für den metastabilen Zustand, läßt sich aus der Extremalbedingung (9.3)

$$m [\mu - U(\vec{x})] = \frac{1}{2} \kappa^2(\vec{x}) + \frac{8 a_1^3}{15\pi} \kappa^5(\vec{x}) \quad (9.3)$$

ableiten. Die rechte Seite zeigt als Funktion des lokalen Fermiimpulses an einem gegebenen Ort ein charakteristisches Verhalten: Für negative p-Wellenstreu­längen bildet die rechte Seite ein Maximum aus und geht für große Fermiimpulse zu negativen Werten über. Die Abbildung 9.4 zeigt dies für verschiedene Werte der Streulänge. Die Lösung der Extremalgleichung ist durch genau solche  $\kappa(\vec{x})$  gegeben, für die diese Funktion gleich der Größe  $[\mu - U(\vec{x})]$  ist.

Offenbar existieren Lösungen im Falle attraktiver Wechselwirkungen nur bis zu einem maximalen Wert von  $[\mu - U(\vec{x})]$ . Diese Einschränkung ist insbesondere am Ort des Minimums des externen Potentials relevant, in dem  $U(\vec{x})$  o.B.d.A. den Wert Null annehmen soll. Somit definiert das Maximum der rechten Seite der Extremalbedingung eine obere Schranke für das chemische Potential, das sog. kritische chemische Potential  $\mu_{\text{crit}}$ , bis zu dem Lösungen der Extremalbedingung (9.3) existieren. Eine einfache Rechnung liefert

$$\mu_{\text{crit}} = \frac{3(3\pi)^{3/2}}{40m a_1^2}. \quad (9.7)$$

Der dem Maximum zugeordnete lokale Fermiimpuls  $\kappa_{\text{crit}}$  ergibt sich zu

$$\kappa_{\text{crit}} = -\frac{\sqrt[3]{3\pi}}{2 a_1}. \quad (9.8)$$

Falls das chemische Potential  $\mu$  kleiner als das kritische chemische Potential  $\mu_{\text{crit}}$  ist, existieren zwei positive reelle Lösungen der Extremalbedingung. Allerdings beschreibt nur die Lösung zum niedrigeren Fermiimpuls (schwarze Kurvensegmente in Abbildung 9.4) ein Minimum der legendretransformierten Energiedichte  $\mathcal{F}[\kappa](\vec{x})$ . Die Lösung zum größeren Fermiimpuls (graue Kurvensegmente) entspricht einem Maximum und besitzt

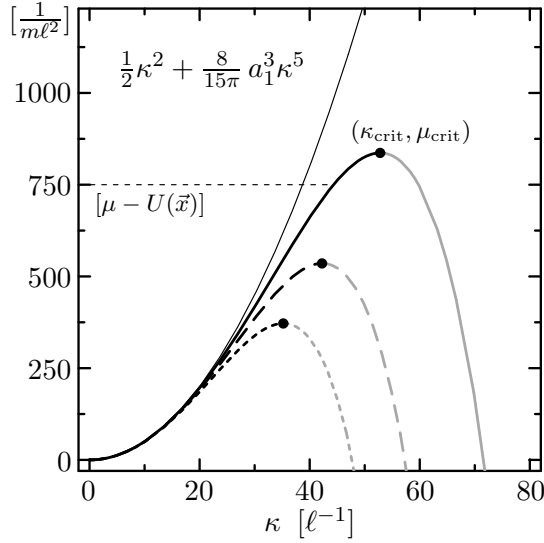


Abbildung 9.4 · Rechte Seite der Extremalbedingung (9.3) als Funktion des lokalen Fermiimpulses für verschiedene attraktive p-Wellenwechselwirkungen mit  $a_1/\ell = -0.02$  (—)  $-0.025$  (---) und  $-0.03$  (.....) bzw. für  $a_1/\ell = 0$  (——). Die grauen Kurvensegmente entsprechen einem Maximum der legendretransformierten Energiedichte  $\mathcal{F}[\kappa]$ , die schwarzen Segmente einem Minimum. Das Maximum der Kurven definiert ein kritisches chemisches Potential  $\mu_{\text{crit}}$  und einen kritischen Fermiimpuls  $\kappa_{\text{crit}}$ .

im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie keine physikalische Bedeutung. Daraus folgt, daß nicht nur das chemische Potential der physikalischen Lösung, sondern auch der lokale Fermiimpuls  $\kappa(\vec{x})$  nach oben beschränkt ist. Beide Schranken sind durch das Maximum der rechten Seite der Extremalbedingung (9.3) definiert.

Damit erhält man zwei Stabilitätsbedingungen, die eine Aussage über die Existenz des metastabilen Zustandes erlauben. Erstens, die TF-Näherung besitzt in Gegenwart attraktiver Wechselwirkung nur Lösungen, deren lokaler Fermiimpuls an jedem Ort kleiner der durch  $\kappa_{\text{crit}}$  gesetzten oberen Schranke ist<sup>1</sup>:

$$-a_1 \kappa(\vec{x}) \leq \frac{\sqrt[3]{3\pi}}{2}. \quad (9.9)$$

Da die Grundzustandsdichte und damit der lokale Fermiimpuls im Minimum des externen Potentials maximal wird, ist diese Einschränkung dort zuerst verletzt. Zweitens, der metastabile Zustand existiert für anziehende Wechselwirkungen nur solange das chemische Potential kleiner als die durch  $\mu_{\text{crit}}$  gegebene Schranke ist:

$$a_1^2 \mu \leq \frac{3(3\pi)^{3/2}}{40m}. \quad (9.10)$$

Ist das angesetzte chemische Potential größer als  $\mu_{\text{crit}}$ , so existiert wiederum keine physikalische Lösung der Extremalbedingung. Das impliziert die Existenz einer maximalen Teilchenzahl für den metastabilen Zustand. Für Systeme mit einer größeren Teilchenzahl existiert kein metastabiler Zustand und es bleibt nur der selbstgebundene Grundzustand hoher Dichte.

Für praktische Belange ist eine Formulierung der Stabilitätsbedingung in den einfachen physikalischen Observablen Teilchenzahl, Oszillatorlänge und Streulänge hilfreich. Eine analytische Darstellung einer solchen Bedingung würde allerdings die geschlossene Lösung der Extremalbedingung voraussetzen. Da dies im allgemeinen nicht möglich ist, bleibt nur eine numerische Behandlung. Dazu wird die Extremalbedingung (9.3)

<sup>1</sup>In einer Arbeit von H.T.C. Stoof und M. Houbiers [StHo98] wird eine Stabilitätsbedingung gleicher Struktur allerdings mit einer um den Faktor  $\sqrt[3]{5\pi^2}/6 \approx 0.6$  modifizierten rechten Seite angegeben. Aus dieser Arbeit geht nicht hervor, wie diese Bedingung abgeleitet wurde.

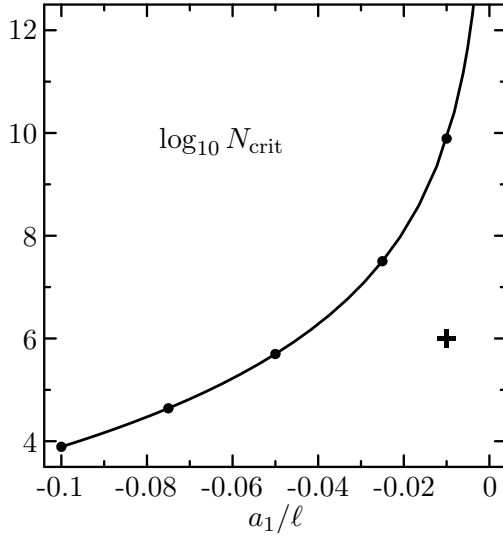


Abbildung 9.5 · Stabilitätsbedingung für das einkomponentige Fermigas im externen Oszillatorpotential in Gegenwart einer attraktiven p-Wellenwechselwirkung. Dargestellt ist der Logarithmus der kritischen Teilchenzahl in Abhängigkeit von der negativen p-Wellenstreulänge  $a_1/\ell$ . Die Punkte zeigen die Ergebnisse der direkten numerischen Rechnung, die Linie (—) entspricht dem Grenzfall der Stabilitätsbedingung (9.11). Das Kreuz markiert die typische Größenordnung derzeit experimentell realisierter Parameter.

für gegebene Wechselwirkungsstärke und maximales chemisches Potential entsprechend (9.10) numerisch gelöst. Das Integral über die resultierende Dichte ergibt die dem chemischen Potential zugeordnete Teilchenzahl. Dies ist die maximale Teilchenzahl, für die ein metastabiler Zustand existiert. Für größere Teilchenzahlen, d.h. größere chemische Potentiale, existiert keine Lösung der Extremalgleichung. Auf diese Weise werden die maximalen Teilchenzahlen für einen Satz von Streulängen  $a_1$  bestimmt.

Davon ausgehend wird eine Parametrisierung für die Stabilitätsbedingung in der Teilchenzahl konstruiert. Es zeigt sich, daß die numerischen Ergebnisse hervorragend durch eine Parametrisierung der Form

$$C \left( \sqrt[6]{N} \frac{a_1}{\ell} \right) \leq 1 \quad \text{mit} \quad C = -2.246 \quad (9.11)$$

reproduziert werden. Die Form der Parametrisierung orientiert sich an der analytischen Lösung des wechselwirkungsfreien Systems. Hier ist der Fermiimpuls (B.40) im Ursprung proportional zu  $\sqrt[6]{N}/\ell$ , so daß sich durch Einsetzen in (9.9) die Struktur der Parametrisierung ergibt. Der Koeffizient  $C$  wird durch Minimierung der mittleren quadratischen Abweichung gegenüber der numerischen Stabilitätsgrenze bestimmt. Die Parametrisierung stimmt mit den Resultaten der Numerik bis auf Abweichungen weit unter einem Prozent überein.

Eine Illustration der Größenordnungen, bei denen diese Stabilitätsbedingung zum Tragen kommt, gibt Abbildung 9.5. Hier ist die kritische Teilchenzahl  $N_{\text{crit}} = [\ell/(Ca_1)]^6$  als Grenzfall der Stabilitätsbedingung (9.11) als Funktion von  $a_1/\ell$  dargestellt. Daneben sind die Resultate der direkten numerischen Bestimmung der kritischen Teilchenzahl für einige Streulängen als Punkte eingetragen, hier zeigt sich die exzellente Übereinstimmung.

Mit derzeit typischen experimentellen Parametern bewegt man sich unterhalb der Stabilitätsgrenze, das Kreuz in der Abbildung markiert typische Parameter:  $a_1 \approx 200a_B$ ,  $\ell \approx 1\mu\text{m}$  und  $N \approx 10^6$ . Zum Erreichen der Stabilitätsgrenze wäre z.B. eine Erhöhung der Wechselwirkungsstärke um einen Faktor vier bzw. eine Verringerung der Oszillatorlänge auf ein Viertel nötig. Das liegt durchaus in dem Parameterbereich, der zukünftigen Experimenten zugänglich sein sollte.

## 9.3 Zweikomponentige Fermigase: Grundlagen

Ultrakalte Gase, bestehend aus zwei fermionischen Spezies, sind im Vergleich zu den einkomponentigen Systemen aus experimenteller wie theoretischer Sicht um ein Vielfaches interessanter. Hauptursache hierfür ist der s-Wellenteil der Wechselwirkung, der nur zwischen verschiedenen fermionischen Spezies nicht jedoch im einkomponentigen System beiträgt. Aus der experimentellen Perspektive ermöglicht die s-Wellenwechselwirkung eine effiziente Evaporationskühlung des zweikomponentigen Systems. Auf diese Weise wurden bereits Temperaturen unterhalb der Fermienergie für ein zweikomponentiges  $^{40}\text{K}$ -System realisiert [DeJi99]. Aus theoretischer wie experimenteller Sicht eröffnet das Zusammenspiel von s- und p-Wellenwechselwirkungen eine Vielzahl interessanter Phänomene von denen zwei, der Kollaps des metastabilen Kondensates sowie die räumliche Separation der beiden Komponenten, in den folgenden Abschnitten näher behandelt werden. Dieser Abschnitt beschäftigt sich mit den formalen Grundlagen sowie allgemeinen Eigenschaften.

### 9.3.1 Thomas-Fermi-Energiedichtefunktional

Aus der allgemeinen Form der Energiedichte (8.32) ergibt sich für das zweikomponentige System, bestehend aus Konstituenten gleicher Masse  $m$ , in der Darstellung durch die lokalen Fermiimpulse  $\kappa_1(\vec{x})$  und  $\kappa_2(\vec{x})$  der beiden Komponenten

$$\begin{aligned} \mathcal{E}[\kappa_1, \kappa_2](\vec{x}) &= \frac{1}{6\pi^2} [U_1(\vec{x}) \kappa_1^3(\vec{x}) + U_2(\vec{x}) \kappa_2^3(\vec{x})] \\ &+ \frac{1}{20\pi^2 m} [\kappa_1^5(\vec{x}) + \kappa_2^5(\vec{x})] + \frac{a_0}{9\pi^3 m} \kappa_1^3(\vec{x}) \kappa_2^3(\vec{x}) \\ &+ \frac{a_1^3}{30\pi^3 m} [\kappa_1^8(\vec{x}) + \kappa_2^8(\vec{x}) + \frac{1}{2} \kappa_1^3(\vec{x}) \kappa_2^5(\vec{x}) + \frac{1}{2} \kappa_1^5(\vec{x}) \kappa_2^3(\vec{x})]. \end{aligned} \quad (9.12)$$

Der wesentliche Unterschied zur Energiedichte des einkomponentigen Systems sind die Kreuzterme in den s- und p-Wellenbeiträgen der effektiven Kontaktwechselwirkung, die die Fermiimpulse der beiden Spezies miteinander koppeln. Insbesondere geht die s-Wellenkomponente hier proportional zum Produkt der Dichten beider Komponenten ein, sie wirkt also nur zwischen Atomen verschiedener Spezies. Die p-Wellenwechselwirkung enthält sowohl Terme proportional den Fermiimpulsen einer Komponente als auch Terme mit dem Produkt der Fermiimpulse beider Komponenten.

Wie in Abschnitt 8.3.2 dargestellt, ergibt sich die Grundzustandsdichte durch Minimierung der Energie unter der Nebenbedingung fester Teilchenzahlen der beiden Spezies. Die Nebenbedingungen werden mit Hilfe zweier Lagrangeparameter, den chemischen Potentialen  $\mu_1$  und  $\mu_2$ , eingeführt. Zu minimieren ist die Legendretransformierte der Energie

$$\begin{aligned} F[\kappa_1, \kappa_2] &= \int d^3x \mathcal{F}[\kappa_1, \kappa_2](\vec{x}) \\ &= \int d^3x \left( \mathcal{E}[\kappa_1, \kappa_2](\vec{x}) - \frac{\mu_1}{6\pi^2} \kappa_1^3(\vec{x}) - \frac{\mu_2}{6\pi^2} \kappa_2^3(\vec{x}) \right). \end{aligned} \quad (9.13)$$

Das führt auf einen Satz von algebraischen Gleichungen (8.39), die eine notwendige Bedingung für ein Minimum darstellen. Für den Fall des zweikomponentigen Fermigases



ergibt sich ein System aus zwei gekoppelten Gleichungen

$$\begin{aligned} m[\mu_1 - U_1(\vec{x})] &= \frac{1}{2} \kappa_1^2(\vec{x}) + \frac{2a_0}{3\pi} \kappa_2^3(\vec{x}) + \frac{a_1^3}{30\pi} [16 \kappa_1^5(\vec{x}) + 3 \kappa_2^5(\vec{x}) + 5 \kappa_1^2(\vec{x}) \kappa_2^3(\vec{x})] \\ m[\mu_2 - U_2(\vec{x})] &= \frac{1}{2} \kappa_2^2(\vec{x}) + \frac{2a_0}{3\pi} \kappa_1^3(\vec{x}) + \frac{a_1^3}{30\pi} [16 \kappa_2^5(\vec{x}) + 3 \kappa_1^5(\vec{x}) + 5 \kappa_2^2(\vec{x}) \kappa_1^3(\vec{x})]. \end{aligned} \quad (9.14)$$

Die trivialen Lösungen  $\kappa_1(\vec{x}) = 0$  bzw.  $\kappa_2(\vec{x}) = 0$  sind hier bereits separiert. Die Kopplung der beiden Polynomgleichungen beruht auf den bereits erwähnten Kreuztermen der s- und p-Wellenwechselwirkung.

Dieses Gleichungssystem bietet in Abhängigkeit von den Wechselwirkungsparametern, den externen Potentialen und den Teilchenzahlen bzw. chemischen Potentialen eine große Vielfalt von Lösungen. In der vorliegenden Arbeit soll von den vereinfachenden Annahmen gleicher Teilchenzahl  $N = N_1 = N_2$  und gleicher Differenz von chemischem Potential und Fallenpotential  $[\mu - U(\vec{x})] = [\mu_1 - U_1(\vec{x})] = [\mu_2 - U_2(\vec{x})]$  ausgegangen werden. Unter diesen Annahmen bleiben aufgrund der Symmetrie der Gleichungen (9.14) gegen Vertauschung der Komponentenindizes nur zwei Klassen von Lösungen.

Erstens, der lokale Fermiimpuls einer Komponente verschwindet für gegebenes  $\vec{x}$  entsprechend der trivialen Lösung. Die dadurch reduzierte Extremalbedingung für die zweite Komponente entspricht der Extremalbedingung (9.3) des einkomponentigen Gases. Um gleiche und von Null verschiedene Teilchenzahlen zu gewährleisten, müssen beide Komponenten in räumlich disjunkten Regionen der Falle lokalisiert sein. Die s-Wellenwechselwirkung trägt für Lösungen dieses Typs nicht bei, da das Produkt der lokalen Fermiimpulse beider Komponenten an jedem Ort verschwindet. Dieser Fall wird für die in Abschnitt 9.5 behandelte Komponentenseparation relevant.

Zweitens, die lokalen Fermiimpulse beider Komponenten sind identisch  $\kappa(\vec{x}) = \kappa_1(\vec{x}) = \kappa_2(\vec{x})$ . Hier vereinfacht sich die Energiedichte (9.12) auf

$$\mathcal{E}[\kappa](\vec{x}) = \frac{1}{3\pi^2} U(\vec{x}) \kappa^3(\vec{x}) + \frac{1}{10\pi^2 m} \kappa^5(\vec{x}) + \frac{a_0}{9\pi^3 m} \kappa^6(\vec{x}) + \frac{a_1^3}{10\pi^3 m} \kappa^8(\vec{x}). \quad (9.15)$$

Im Unterschied zur Energiedichte des einkomponentigen Gases tritt hier ein Beitrag der s-Wellenwechselwirkung, der proportional zu  $\kappa^6(\vec{x})$  ist, in Erscheinung. Das gekoppelte System der Extremalbedingungen (9.14) vereinfacht sich auf eine einzige Gleichung

$$m[\mu - U(\vec{x})] = \frac{1}{2} \kappa^2(\vec{x}) + \frac{2a_0}{3\pi} \kappa^3(\vec{x}) + \frac{4a_1^3}{5\pi} \kappa^5(\vec{x}). \quad (9.16)$$

Es handelt sich um eine Polynomgleichung fünften Grades, die mit den Mitteln analysiert werden kann, die bereits im Falle des einkomponentigen Fermigases Anwendung fanden. Die Zahl der positiven reellen Nullstellen, die als potentielle physikalische Lösungen in Frage kommen, kann mit der Descartesschen Zeichenregel (vgl. Abschnitt 9.1.1) bestimmt werden. In Abhängigkeit von den Wechselwirkungsparametern  $a_0$  und  $a_1$  lassen sich folgende Fälle unterscheiden:

- $a_0 \geq 0, a_1 \geq 0$ : Es existiert genau eine positive reelle Lösung der Extremalbedingung (9.16) innerhalb des klassisch erlaubten Bereichs  $\mu > U(\vec{x})$ .
- $a_0 \leq 0, a_1 \leq 0$  und  $a_0 > 0, a_1 < 0$ : Es existieren keine oder zwei positive reelle Lösungen, wobei im letzten Fall eine der Lösungen einem Maximum, die andere



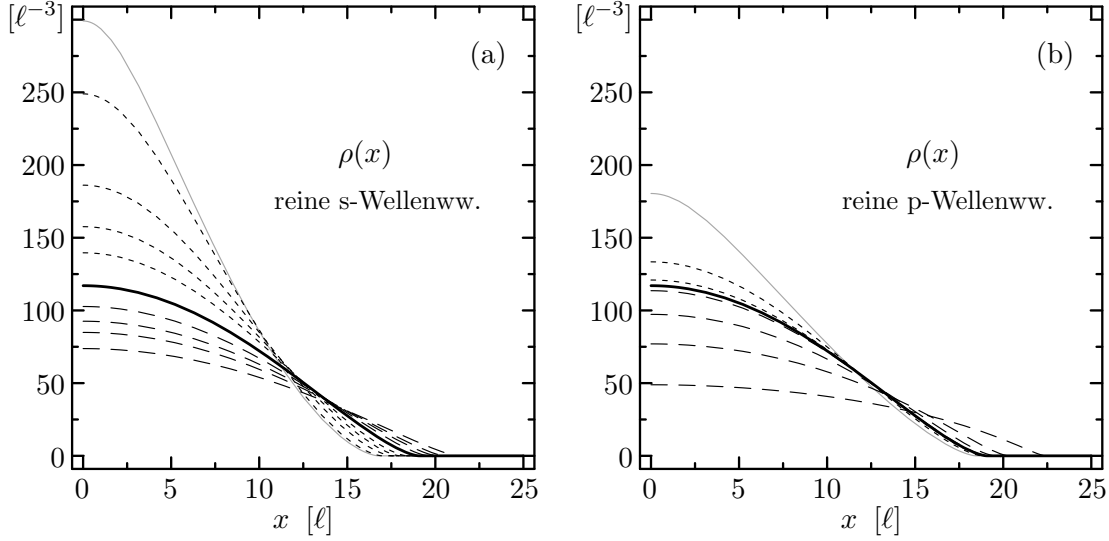


Abbildung 9.6 · Dichten für ein zweikomponentiges Fermigas mit  $N = 10^6$  Teilchen pro Komponente mit reiner s-Wellen- (a) bzw. reiner p-Wellenwechselwirkung (b). Die Kurven entsprechen anziehenden Wechselwirkungen mit Streulängen  $a_0/\ell = -0.02, -0.03, -0.04, -0.05$  bzw.  $a_1/\ell = -0.02, -0.03$  (-----) sowie abstoßenden Wechselwirkungen mit  $a_1/\ell = 0.02, 0.04, 0.06$  und  $0.1$  (---). Zur Orientierung sind die wechselwirkungsfreie Lösung (—) und die Lösung nahe der Stabilitätsgrenze (——) für  $a_0/\ell = -0.053$  bzw.  $a_1/\ell = -0.038$  ebenfalls dargestellt.

einem Minimum von  $F[\kappa_1, \kappa_2]$  entspricht. Analog zum einkomponentigen System existiert eine von den Wechselwirkungsparametern abhängige Bedingung für die Existenz eines metastabilen Fermigases. Dieser Fall wird in Abschnitt 9.4.1 ausführlich diskutiert.

- $a_0 < 0, a_1 > 0$ : Die Extremalbedingung besitzt eine bzw. drei positive reelle Lösungen, von denen eine bzw. zwei einem Minimum von  $F[\kappa_1, \kappa_2]$  entsprechen. Formal existiert für beliebige  $[\mu - U(\vec{x})]$  eine Lösung, physikalisch handelt es sich jedoch nicht immer um einen metastabilen Zustand. Ein genauere Untersuchung in Abschnitt 9.4.2 zeigt, daß hier ein Phasenübergang zu einer neuartigen Hochdichtephase auftritt, die allein durch die abstoßende p-Wellenkomponente stabilisiert wird.

### 9.3.2 Einfluß der Wechselwirkung

In diesem Abschnitt soll ein Überblick über den Einfluß der Wechselwirkung auf die Struktur des zweikomponentigen Fermigases gegeben werden. Dazu wird die Extremalbedingung (9.16), die unter der Annahme gleicher Teilchenzahlen  $N = N_1 = N_2$  für beide Komponenten gültig ist, numerisch gelöst.

Einen ersten Eindruck über den Einfluß der s- bzw. p-Wellenwechselwirkung auf die Struktur des zweikomponentigen Fermigases gibt Abbildung 9.6. Hier sind die Dichten für ein System mit  $N = 10^6$  Teilchen je Komponente in einem sphärischen Oszillator mit Oszillatorlänge  $\ell$  für verschiedene positive und negative s- bzw. p-Wellenstreulängen dargestellt. Die jeweils andere Wechselwirkungskomponente wird Null gesetzt.

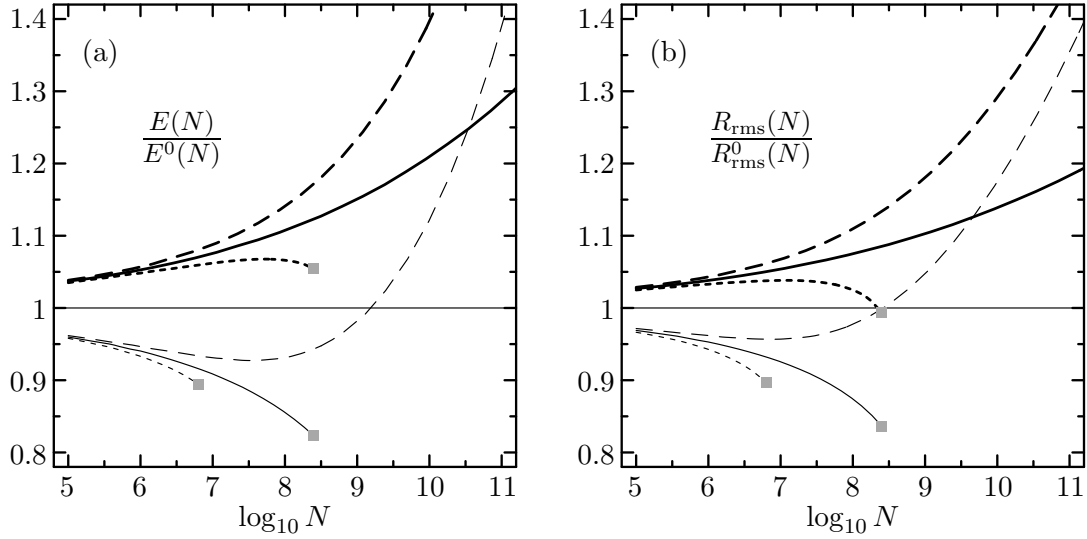


Abbildung 9.7 · Energie und rms-Radius des zweikomponentigen Fermigases als Funktion des Logarithmus der Teilchenzahl für verschiedene Wechselwirkungen. Beide Größen sind auf die Werte der wechselwirkungsfreien Lösung zur entsprechenden Teilchenzahl normiert. Die dicken Linien entsprechen Wechselwirkungen mit  $a_0/\ell = 0.02$ , dünne Linien  $a_0/\ell = -0.02$ . Für die p-Wellenstreuweiten der verschiedenen Fälle gilt:  $a_1/\ell = 0$  (—),  $0.02$  (---) und  $-0.02$  (.....). Die grauen Quadrate markieren die kritischen Teilchenzahlen.

Allgemein gilt, daß abstoßende Wechselwirkungen zu einer Absenkung der zentralen Dichte und einer Erhöhung des Radius der Dichteverteilungen führen. Umgekehrt verringern anziehende Wechselwirkungen den Radius und erhöhen die zentrale Dichte. Über dieses allgemeine Verhalten hinaus haben s- und p-Wellenwechselwirkungen verschiedene Auswirkungen. Für kleine Beträge der Streulänge hat die s-Wellenwechselwirkung mehr Einfluß auf die Form der Dichte als eine p-Wellenwechselwirkung mit gleicher Streulänge. Bei größeren Streulängen zeigt sich das umgekehrte Verhalten, die Dichte wird für abstoßende p-Wellenwechselwirkungen stärker unterdrückt, es ergibt sich eine flache, weit ausgedehnte Verteilung. Desweiteren tritt der Kollaps infolge anziehender p-Wellenwechselwirkungen bei sehr viel kleineren Streulängen und niedrigeren Dichten ein als für anziehende s-Wellenwechselwirkungen. Dieses Verhalten läßt sich anhand der analytischen Form der Energiedichte (9.15) verstehen: Der Beitrag der s-Wellenwechselwirkung ist proportional zu  $a_0$  und  $\kappa^6(\vec{x})$ , während der p-Wellenbeitrag proportional zu  $a_1^3$  und  $\kappa^8(\vec{x})$  ist. Die höhere Potenz, mit der der lokale Fermiimpuls in die Energiedichte eingeht, erklärt die höhere Sensitivität der p-Wellenkomponente auf die Dichte. Die Tatsache, daß die p-Wellenstreuweite kubisch eingeht begründet, warum erst bei größeren Beträgen ein signifikanter Effekt zu beobachten ist.

Aus dem Zusammenspiel von s- und p-Wellenterm ergeben sich vielfältige Möglichkeiten. Zur Illustration sind in Abbildung 9.7 die Energien und rms-Radien, bezogen auf die Werte für das wechselwirkungsfreie System, als Funktion der Teilchenzahl für verschiedene Kombinationen der beiden Streulängen aufgetragen. Die oberen Kurvenscharen gelten für abstoßende s-Wellenwechselwirkungen  $a_0/\ell = 0.02$ , die unteren für anziehende  $a_0/\ell = -0.02$ . Die drei Kurven jeder Schar beziehen sich auf  $a_1/\ell = -0.02, 0$  und  $0.02$  (von unten nach oben). Die Graphik macht deutlich, daß die s-Wellenwechselwirkung in Systemen kleiner Teilchenzahl dominant ist. Mit zuneh-

mender Teilchenzahl gewinnt die p-Wellenwechselwirkung jedoch schnell an Bedeutung und bestimmt die Struktur der Systeme bei großer Teilchenzahl völlig. In Anbetracht dessen ist es angeraten, die p-Wellenwechselwirkung bei der Untersuchung der Struktur der ultrakalten Fermigase gleichberechtigt mit der s-Wellenwechselwirkung zu berücksichtigen. Ob die Effekte des p-Wellenbeitrags zu vernachlässigen sind, ist anhand des Endergebnisses zu entscheiden.

Ein wichtiger Aspekt ist die Stabilität der Fermigase gegenüber einem Kollaps in einen gebundenen Zustand hoher Dichte. Wie bei den einkomponentigen Systemen tritt dieser Kollaps bei „anziehenden“ Wechselwirkungen oberhalb einer kritischen Teilchenzahl auf, die entsprechenden Punkte sind in der Abbildung 9.7 durch graue Quadrate gekennzeichnet. Offenbar tritt der Kollaps nicht nur für rein anziehende Wechselwirkungen, d.h. solche mit negativen Streulängen in s- und p-Welle, sondern auch für solche mit anziehender p-Welle und abstoßender s-Welle auf. Umgekehrt zeigt das System mit anziehender s-Welle und abstoßender p-Welle keinen Kollaps. Diese durch das Wechselspiel zwischen s- und p-Wellenwechselwirkung sehr reichhaltigen Stabilitätseigenschaften des zweikomponentigen Fermigases sind Gegenstand des folgenden Abschnitts.

## 9.4 Zweikomponentige Fermigase: Stabilität

Dieser Abschnitt beschäftigt sich im Detail mit der Stabilität des verdünnten zweikomponentigen Fermigas in Gegenwart anziehender Wechselwirkungen. Da beide Wechselwirkungskomponenten zur Energiedichte beitragen, hängt es sowohl von der s- als auch der p-Wellenstreulänge ab, ob ein metastabiler Zustand als Lösung der Extremalbedingung (9.16) existiert. Hier sind zwei Klassen von „anziehenden“ Wechselwirkungen zu unterscheiden: Solche mit negativen oder verschwindenden p-Wellenstreulängen, sie werden im folgenden Abschnitt behandelt, und solche mit positiven p-Wellenstreulängen. Letztere zeigen einige besondere Phänomene, die in den Abschnitten 9.4.2 und 9.4.3 untersucht werden.

### 9.4.1 Die Fälle $a_0 \leq 0, a_1 \leq 0$ und $a_0 > 0, a_1 < 0$

Wie im Falle des einkomponentigen Kondensates besteht für attraktive Wechselwirkungen die Möglichkeit, daß kein metastabiler Zustand als Lösung der Extremalbedingung (9.16) existiert. Da im zweikomponentigen Gas sowohl s- als auch p-Wellenwechselwirkung beitragen, hängt die Existenz eines metastabilen Kondensates von der s- und p-Wellenstreulänge und der Teilchenzahl des System ab. In diesem Abschnitt werden rein anziehende Wechselwirkungen, d.h.  $a_0 \leq 0$  und  $a_1 \leq 0$ , sowie Wechselwirkungen mit abstoßender s-Wellenkomponente  $a_0 > 0$  und anziehender p-Wellenkomponente  $a_1 < 0$  diskutiert. Der Fall anziehender s-Wellenwechselwirkung und abstoßender p-Wellenwechselwirkung zeigt einige Besonderheiten und wird im folgenden Abschnitt gesondert behandelt.

Wie im Falle der einkomponentigen Fermigase lassen sich analytische Grenzen für die Existenz des metastabilen Zustandes direkt aus der Extremalbedingung (9.16)

$$m[\mu - U(\vec{x})] = \frac{1}{2} \kappa^2(\vec{x}) + \frac{2a_0}{3\pi} \kappa^3(\vec{x}) + \frac{4a_1^3}{5\pi} \kappa^5(\vec{x}), \quad (9.16)$$

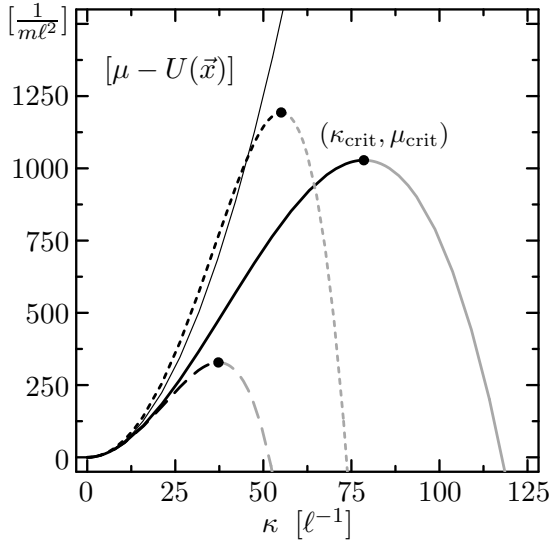


Abbildung 9.8 · Rechte Seite der Extremalbedingung (9.16) für das zweikomponentige Fermigas als Funktion des lokalen Fermiimpulses für verschiedene attraktive s- und p-Wellenwechselwirkungen mit  $(a_0/\ell, a_1/\ell) = (-0.02, 0)$  (—),  $(-0.02, -0.02)$  (---) und  $(+0.02, -0.02)$  (.....) und für das wechselwirkungsfreie System (—). Die grauen Kurvensegmente entsprechen einem Energiemaximum, die schwarzen einem Energieminimum. Die Punkte markieren den kritischen Fermiimpuls und das kritische chemische Potential.

die unter der Annahme gleicher chemischer Potentiale beider Komponenten gilt, ableiten. Die Abbildung 9.8 zeigt die rechte Seite der Extremalbedingung als Funktion des lokalen Fermiimpulses für verschiedene Wechselwirkungsstärken. Da bei den hier betrachteten Wechselwirkungstypen der führende Term mit negativen Koeffizienten eingeht, besitzt die rechte Seite ein absolutes Maximum bei endlichen Fermiimpulsen und fällt bei großen Fermiimpulsen auf zunehmend negative Werte ab. Der dem Maximum zugeordnete Fermiimpuls ergibt sich als Lösung der Gleichung

$$-a_0 \kappa_{\text{crit}} - 2(a_1 \kappa_{\text{crit}})^3 = \pi/2. \quad (9.17)$$

Diese Gleichung stellt eine erste Form der Stabilitätsbedingung für das zweikomponentige Fermigas dar. Die Extremalbedingung besitzt für Wechselwirkungen mit  $a_0 \leq 0, a_1 \leq 0$  bzw.  $a_0 > 0, a_1 < 0$  keine Lösung zu Fermiimpulsen größer diesem kritischen Fermiimpuls  $\kappa_{\text{crit}}$ , die mit einem Minimum der Energie in Thomas-Fermi-Näherung identifiziert werden können. Die formalen Lösungen der Extremalbedingungen mit Fermiimpulsen jenseits der Maximums sind mit einem Energiemaximum verknüpft und beschreiben keinen Gleichgewichtszustand. Der metastabile Zustand des zweikomponentigen Kondensates existiert also nur solange die Stabilitätsbedingung

$$-a_0 \kappa(\vec{x}) - 2(a_1 \kappa(\vec{x}))^3 \leq \pi/2 \quad (9.18)$$

erfüllt ist. Diese Bedingung stellt insbesondere eine Einschränkung am Ort des Minimums des externen Potentials dar, im Falle des harmonischen Oszillators also  $\vec{x} = 0$ . Durch Einsetzen des kritischen Fermiimpulses in die Extremalbedingung (9.16) ergibt sich ein kritisches chemisches Potential  $\mu_{\text{crit}}$ , das dem Wert des Maximums der rechten Seite entspricht. Daraus ergibt sich eine alternative Formulierung der Stabilitätsbedingung: Für Systeme mit chemischen Potentialen größer  $\mu_{\text{crit}}$  existiert kein metastabiler Zustand.

Diese Bedingung zeigt, daß beide Wechselwirkungskomponenten gleichermaßen über die Stabilität des Kondensates entscheiden. Im Falle einer rein anziehenden Wechselwirkung stellt die Stabilitätsbedingung eine obere Schranke für den Betrag der Streulängen beider Partialwellen dar. Dabei ist nur die Summe beider Komponenten für die Existenz des metastabilen Zustandes entscheidend, d.h. eine der beiden Komponenten

kann durchaus eine stärkere Anziehung vermitteln ohne den Kollaps des Fermigases zu bewirken, solange die andere Komponente nur entsprechend schwach anziehend ist. Im Falle einer anziehenden p-Wellen- und einer abstoßenden s-Wellenkomponente, führt die abstoßende Komponente zu einer Stabilisierung, indem der kritische Fermiimpuls bei konstanter negativer p-Wellenstreulänge mit wachsender positiver s-Wellenstreulänge ansteigt.

Im Falle verschwindender p-Wellenstreuängen reduziert sich die Stabilitätsbedingung (9.18) auf die einfache Beziehung

$$-a_0 \kappa(\vec{x}) \leq \pi/2. \quad (9.19)$$

Diese Form wurde bereits von H.T.C. Stoof et al. [StBi96, HoFe97, StHo98] durch Untersuchung der Stabilität einer homogenen, aus zwei Spinkomponenten zusammengesetzten Fermiflüssigkeit gegen Spindichtefluktuationen gefunden. Die hier angestellten Untersuchungen unter Einbeziehung der p-Wellenkomponente der effektiven Kontaktwechselwirkung zeigen, daß diese Beziehung wirklich nur im Falle verschwindender oder vernachlässigbarer p-Wellenstreuängen anwendbar ist. Der p-Wellenbeitrag hat deutlichen Einfluß auf die Stabilität. Er ist erst dann vernachlässigbar, wenn die p-Wellenstreulänge um mehr als eine Größenordnung kleiner als die s-Wellenstreulänge ist.

Für gegebene Wechselwirkungsstärken läßt sich aus (9.17) der kritische Fermiimpuls und durch Einsetzen in (9.16) das kritische chemische Potential  $\mu_{\text{crit}}$  bestimmen. Durch numerische Lösung der Extremalbedingung für dieses chemische Potential und Integration der resultierenden Dichte ergibt sich die kritische Teilchenzahl  $N_{\text{crit}}$  für jede der beiden Komponenten. Die so bestimmten kritischen Teilchenzahlen können zur Konstruktion einer einfachen Parametrisierung der Stabilitätsbedingung in Abhängigkeit von der Teilchenzahl  $N$ , der Oszillatorlänge  $\ell$  und der Streulängen  $a_0$  und  $a_1$  benutzt werden.

Die Parametrisierung orientiert sich an der analytischen Lösung für den wechselwirkungsfreien Fall, der zufolge der lokale Fermiimpuls im Ursprung proportional zu  $\sqrt[6]{N}/\ell$  ist. Wie sich bereits beim einkomponentigen Fermigas in Abschnitt 9.2.2 gezeigt hat, ist die dimensionslose Größe  $\sqrt[6]{N} a_i/\ell$  eine universelle Variable für Fragen der Stabilität. Damit lassen sich in einem ersten Schritt die Stabilitätsbedingungen für die Spezialfälle verschwindender s- bzw. verschwindender p-Wellenwechselwirkung darstellen. Mit dem durch Anpassung an die kritischen Teilchenzahlen aus der numerischen Lösung festgelegten Koeffizienten ergibt sich für den Fall verschwindender p-Wellenstreulänge

$$-1.835 \left( \sqrt[6]{N} \frac{a_0}{\ell} \right) \leq 1 \quad \text{für } a_0 \leq 0, a_1 = 0. \quad (9.20)$$

Entsprechend gilt bei verschwindender s-Wellenstreulänge

$$-2.570 \left( \sqrt[6]{N} \frac{a_1}{\ell} \right) \leq 1 \quad \text{für } a_0 = 0, a_1 \leq 0. \quad (9.21)$$

Beide Parametrisierungen reproduzieren die numerisch bestimmten kritischen Teilchenzahlen bis auf relative Abweichungen weit unter einem Prozent, was bereits auf dem Niveau der Unsicherheiten der numerischen Rechnung liegt.

In Analogie zur analytischen Form (9.18) kann eine Parametrisierung der Stabilitätsbedingung für allgemeine Wechselwirkungen konstruiert werden. Um die numerisch bestimmte Stabilitätsgrenze für allgemeine Wechselwirkungen in gleicher Genauigkeit

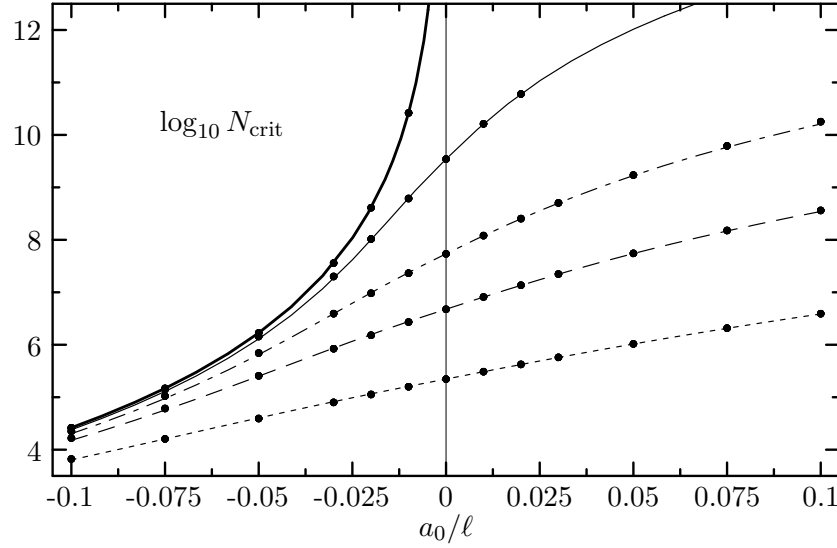


Abbildung 9.9 · Logarithmus der kritischen Teilchenzahl als Funktion der s-Wellenstreuungslänge  $a_0/\ell$  für attraktive oder verschwindende p-Wellenwechselwirkungen mit  $a_1/\ell = 0$  (—),  $-0.01$  (— · —),  $-0.02$  (---),  $-0.03$  (---) und  $-0.05$  (-----). Die Punkte entstammen der direkten numerischen Rechnung, die Kurven geben den Grenzfall der Stabilitätsbedingung (9.22) wieder.

wie in den beiden Spezialfällen zu reproduzieren, ist es nötig, einen phänomenologischen Kreuzterm einzuführen, der aus dem Produkt der ersten beiden Terme gebildet ist. Dies führt auf die allgemeine Parametrisierung

$$C_0 \left( \sqrt[6]{N} \frac{a_0}{\ell} \right) + C_1^3 \left( \sqrt[6]{N} \frac{a_1}{\ell} \right)^3 + C_{01}^2 \left( \sqrt[6]{N} \frac{a_0}{\ell} \right) \left( \sqrt[6]{N} \frac{a_1}{\ell} \right)^\nu \leq 1. \quad (9.22)$$

Die Koeffizienten  $C_0$ ,  $C_1$  und  $C_{01}$  sind für die beiden untersuchten Wechselwirkungstypen separat zu bestimmen. Dabei ist zu beachten, daß in den Grenzfällen  $a_1 \rightarrow 0$  bei  $a_0 < 0$  bzw.  $a_0 \rightarrow 0$  für  $a_1 < 0$  die Stabilitätsbedingungen (9.20) bzw. (9.21) reproduziert werden. Dadurch sind für den Typ  $a_0 \leq 0, a_1 \leq 0$  die Koeffizienten  $C_0$  und  $C_1$  und im Falle  $a_0 > 0, a_1 < 0$  ist der Koeffizient  $C_1$  festgelegt. Die Anpassung der verbleibenden Koeffizienten an die numerisch bestimmten Stabilitätsgrenzen führt auf die in Tabelle 9.1 zusammengefaßten Parameter. Der Exponent  $\nu$  ist für die hier betrachteten Fälle gleich 1, im folgenden Abschnitt wird jedoch eine Modifikation nötig. Die relative Abweichung der parametrisierten Stabilitätsbedingung vom numerischen Resultat liegt wiederum deutlich unter 1%.

Die kritischen Teilchenzahlen für Wechselwirkungen mit anziehender oder verschwindender p-Wellenkomponente ( $a_1 \leq 0$ ) sind in Abbildung 9.9 in Abhängigkeit von der

Wechselwirkung	$C_0$	$C_1$	$C_{01}$	$\nu$
$a_0 \leq 0, a_1 = 0$	-1.835	—	—	—
$a_0 = 0, a_1 \leq 0$	—	-2.570	—	—
$a_0 \leq 0, a_1 \leq 0$	-1.835	-2.570	0.656	1
$a_0 \geq 0, a_1 < 0$	-1.378	-2.570	1.360	1
$a_0 < 0, a_1 \geq 0$	-1.835	-1.940	2.246	3

Tabelle 9.1 · Koeffizienten der parametrisierten Stabilitätsbedingung (9.22) für das zweikomponentige Fermigas für die verschiedenen Wechselwirkungstypen.

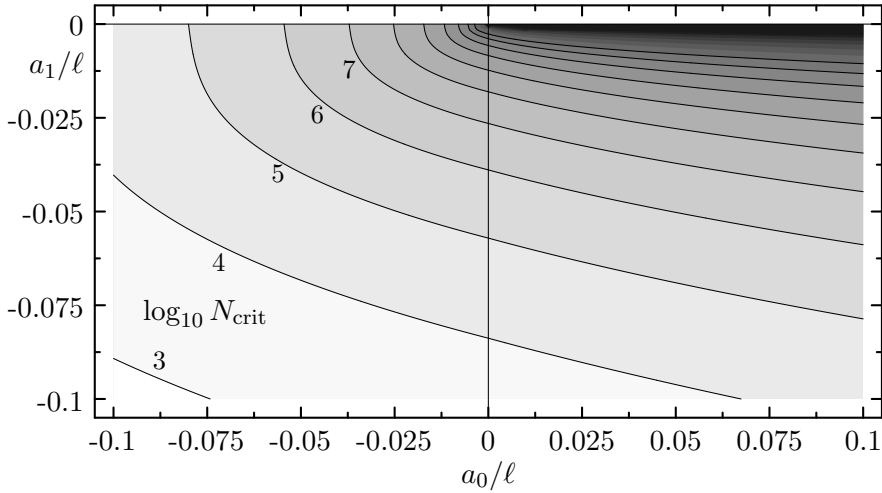


Abbildung 9.10 · „Stabilitätskarte“ für zweikomponentige Fermigase mit attraktiven bzw. verschwindenden p-Wellenwechselwirkungen ( $a_1 \leq 0$ ). Die Konturgraphik zeigt den Logarithmus der kritischen Teilchenzahl als Funktion der beiden Streulängen  $a_0/\ell$  und  $a_1/\ell$ . Die Konturen sind in Schritten einer Zehnerpotenz der Teilchenzahl gesetzt und decken den Bereich  $N_{\text{crit}} = 10^3 \dots 10^{13}$  ab.

s-Wellenstreulänge für verschiedene p-Wellenstreulängen aufgetragen. Die Punkte entstammen der direkten numerischen Bestimmung der kritischen Teilchenzahl. Die Kurven entsprechen der parametrisierten Stabilitätsbedingung (9.22) mit den Koeffizienten nach Tabelle 9.1 und stimmen sehr gut mit der numerischen Rechnung überein. Die Abbildung 9.9 macht deutlich, daß die p-Wellenwechselwirkung von großer Bedeutung für die Stabilität des Kondensates ist. Im Falle verschwindender p-Wellenwechselwirkung ist die Teilchenzahl des metastabilen Kondensates nur für negative  $a_0$  beschränkt. Sobald eine anziehende p-Wellenkomponente auftritt, ergibt sich auch für abstoßende s-Wellenwechselwirkungen eine Beschränkung der Teilchenzahl. Die s-Wellenabstoßung wirkt hier stabilisierend, indem die kritische Teilchenzahl mit wachsendem positivem  $a_0$  leicht anwächst. Offenbar ist eine abstoßende s-Wellenwechselwirkung kein Garant für einen metastabilen Kondensatzustand für beliebige Teilchenzahlen. Vielmehr dominiert die anziehende p-Wellenkomponente und führt zu einer endlichen kritischen Teilchenzahl für beliebige  $a_0$ .

Eine alternative Darstellung der Stabilitätsgrenzen des zweikomponentigen Fermigas findet sich in Abbildung 9.10. Hier ist der Logarithmus der kritischen Teilchenzahl als Funktion der beiden Streulängen in Form einer Konturgraphik gezeigt. Je dunkler die Schattierung, desto größer die kritische Teilchenzahl. Im Bereich der positiven  $a_0$ -Achse divergiert die kritische Teilchenzahl gegen unendlich, was durch die schwarze Füllung symbolisiert wird. Diese Graphik macht die Bedeutung der p-Wellenkomponente für die Stabilität des Kondensates besonders deutlich. Eine Veränderung der p-Wellenstreulänge hat viel größeren Einfluß auf die kritische Teilchenzahl als eine vergleichbare Änderung der s-Wellenstreulänge. Vergleicht man z.B. eine reine p-Wellenwechselwirkung mit gegebener negativer Streulänge mit einer reinen s-Wellenwechselwirkung gleicher Streulänge, so ist die kritische Teilchenzahl im ersten Falle deutlich niedriger. Die p-Wellenkomponente setzt also strengere Stabilitätsgrenzen als eine entsprechende s-Wellenwechselwirkung. Insbesondere bewirkt eine s-Wellenabstoßung nur eine vergleichsweise geringe Erhöhung der kritischen Teilchenzahl, d.h. Stabilisierung des Fermigas,



in Gegenwart einer anziehenden p-Wellenkomponente.

Unter diesen Gesichtspunkten erscheint eine Vernachlässigung der p-Wellenwechselwirkung für die Untersuchung der Stabilität nur zu vertreten, wenn die p-Wellenstreuung um deutlich mehr als eine Größenordnung unter der s-Wellenstreuung liegt.

#### 9.4.2 Der Fall $a_0 < 0$ , $a_1 > 0$

Ein Reihe besonderer Effekte zeigt sich im Falle anziehender s-Wellen- und abstoßender p-Wellenwechselwirkungen. Das Verhalten der rechten Seite der Extremalbedingung (9.16) für große Fermiimpulse wird von dem zu  $\kappa^5$  proportionalen Beitrag der p-Wellenwechselwirkung bestimmt. Im Unterschied zu den im vorangehenden Abschnitt betrachteten Wechselwirkungstypen wächst die rechte Seite für große  $\kappa$  bei positivem  $a_1$  zu beliebig großen Werten. Die Abbildung 9.11 zeigt einige Beispiele für die funktionale Abhängigkeit der rechten Seite der Gleichung (9.16) vom lokalen Fermiimpuls für verschiedene p-Wellenstreuungen. Anhand der Struktur der rechten Seite der Extremalbedingung lassen sich drei Wechselwirkungsregime unterscheiden. Das relevante Maß ist hierbei das Verhältnis der p-Wellenstreuung zum Betrag der s-Wellenstreuung  $a_1/|a_0|$ .

Für Streulängenverhältnisse oberhalb einer gewissen Schranke, d.h. für hinreichend stark abstoßende p-Wellenwechselwirkungen, wächst die rechte Seite der Extremalbedingung (9.16) monoton mit dem lokalen Fermiimpuls, d.h. es tritt kein lokales Maximum mehr auf. Ein Beispiel zeigt die punktierte Kurve in Abbildung 9.11. Die Stabilitätsbedingung (9.18) ist für derartige Wechselwirkungen für beliebige Fermiimpulse trivial erfüllt. Aus ihr ergibt sich eine analytische Bedingung für Monotonie der rechten Seite der Extremalbedingung

$$\frac{a_1}{|a_0|} \geq \frac{2}{3\pi^{2/3}} \approx 0.311. \quad (9.23)$$

Erfüllt das Verhältnis der Streulängen diese Bedingung, dann existiert für beliebige Werte von  $[\mu - U(\vec{x})]$  genau eine Lösung der Extremalbedingung, die einem Minimum der Energie unter der Nebenbedingung gegebener Teilchenzahl entspricht. Mit anderen Worten: Der metastabile Zustand existiert für beliebige chemische Potentiale und mithin für beliebige Teilchenzahlen. Die schwach abstoßende p-Wellenwechselwirkung ist in der Lage, das System für beliebige Teilchenzahlen gegen den durch die anziehende s-Wellenwechselwirkung induzierten Kollaps zu stabilisieren.

Fällt das Streulängenverhältnis unter die durch (9.23) gesetzte Grenze, dann tritt bei mittleren Fermiimpulsen zunächst ein Sattelpunkt und dann ein lokales Maximum sowie ein lokales Minimum auf. Ein typisches Beispiel hierfür zeigt die durchgezogene Kurve in Abbildung 9.11 und die Abbildung 9.12(a). Die einem Minimum in der Energiedichte entsprechenden Lösungen der Extremalbedingung (9.16) liegen auf zwei separaten Zweigen der dargestellten Kurve, einem bei niedrigen Dichten und einem bei hohen Dichten. Der Niederdichtezweig ist durch den Beitrag der kinetischen Energie gegen den Kollaps stabilisiert und wird bezüglich des Fermiimpulses und des chemischen Potentials durch das lokale Maximum ( $\kappa_{\text{crit}}, \mu_{\text{crit}}$ ) nach oben begrenzt. Der Hochdichtezweig hingegen ist durch das lokale Minimum ( $\kappa_{\text{min}}, \mu_{\text{min}}$ ) nach unten beschränkt und wird allein durch die abstoßende p-Wellenwechselwirkung stabilisiert.

Sofern  $[\mu - U(\vec{x})]$  kleiner als der Wert des lokalen Minimums  $\mu_{\text{min}}$  ist, existiert genau eine Lösung der Extremalbedingung, die auf dem Niederdichtezweig liegt. Ein Beispiel



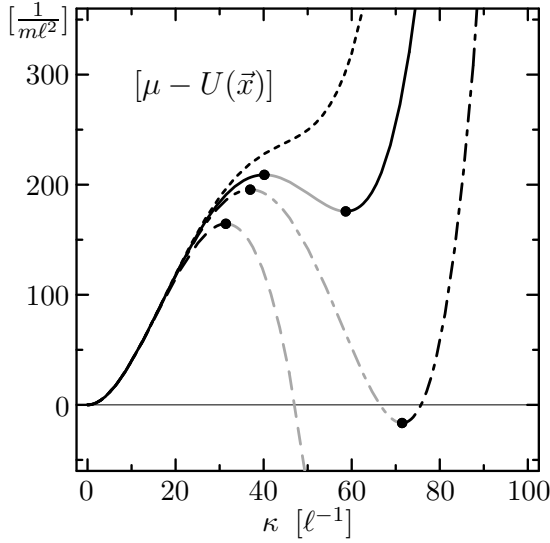


Abbildung 9.11 · Rechte Seite der Extremalbedingung (9.16) für das zweikomponentige Fermigas als Funktion des lokalen Fermimpulses  $\kappa$  für negative s-Wellenstreuulänge  $a_0/\ell = -0.05$  und verschiedene positive p-Wellenstreuulängen  $a_1/\ell = 0.016$  (.....),  $0.015$  (—),  $0.014$  (-.-.-) und  $0$  (- - -). Die schwarzen Segmente beschreiben lokale Energieminima, die grauen Segmente Energiemaxima.

dafür ist in Abbildung 9.12 in dem mit ① bezeichnete Fall gezeigt.

Liegt das chemische Potential über dem Wert des kritischen chemischen Potentials  $\mu_{\text{crit}}$ , das den Niederdichte- und Hochdichtezweig begrenzt, so existiert nur noch die Lösung auf dem Hochdichtezweig. In diesem Fall bildet sich im Zentrum der Falle eine neuartige Hochdichtephase aus, die durch einen diskontinuierlichen Sprung von der regulären Niederdichtephase getrennt ist. Ein Beispiel hierfür ist in Fall ③ der Abbildung 9.12 gezeigt. Die Stabilitätsbedingung (9.18) und das dazugehörige kritische chemische Potential geben für diesen Wechselwirkungstypus eine obere Schranke für einen reinen Niederdichtezustand an. Im Gegensatz zu den im vorangehenden Abschnitt diskutierten Typen anziehender Wechselwirkungen kollabiert das Fermigas bei Überschreiten der Schranke nicht. Stattdessen bildet das System eine p-wellenstabilisierte Hochdichtephase im Zentrum der Falle aus.

Die p-wellenstabilisierte Hochdichtephase kann schon vor Überschreiten des kritischen chemischen Potentials auftreten. Wie die Abbildung 9.12(a) zeigt, existieren für  $\mu_{\text{min}} \leq [\mu - U(\vec{x})] \leq \mu_{\text{crit}}$  zwei Lösungen der Extremalbedingung, die einem lokalen Minimum der legendretransformierten Energiedichte  $\mathcal{F}[\kappa]$  entsprechen. Im unteren Teil des Bereichs ist das Minimum bei niedrigen Dichten energetisch bevorzugt, am oberen Ende des Bereichs das Minimum auf dem Hochdichtezweig. Der Punkt, für den  $\mathcal{F}[\kappa]$  in beiden lokalen Minima den gleichen Wert annimmt, definiert ein chemisches Potential  $\mu_{\text{trans}}$ . In einem Gleichgewichtszustand wird die Hochdichtephase genau dann in Erscheinung treten, wenn das zugehörige Minimum eine niedrigere Energiedichte ausweist als die Lösung auf dem Niederdichtezweig, d.h. sobald  $[\mu - U(\vec{x})] \geq \mu_{\text{trans}}$ . In Abbildung 9.12(a) ist dieser Übergang im Sinne einer „Maxwell-Konstruktion“ angedeutet. Die Lösungen auf dem Niederdichtezweig jenseits von  $\mu_{\text{trans}}$  sind metastabil gegen einen Übergang zu der energetisch niedrigeren Lösung auf dem Hochdichtezweig. Es hängt von der detaillierten Dynamik ab, wann in einem Nichtgleichgewichtssystem mit wachsender Teilchenzahl der Übergang von der metastabilen Niederdichte- zur Hochdichtelösung auftritt. Dies wird im folgenden Abschnitt näher diskutiert. Die hier angestellte Analyse zeigt, daß das Auftreten einer Hochdichtephase für  $\mu > \mu_{\text{trans}}$  möglich und für  $\mu > \mu_{\text{crit}}$  notwendig ist.

Mit fallendem Verhältnis der beiden Streulängen  $a_1/|a_0|$  sinkt sowohl das dem lokalen Minimum zugeordnete chemische Potential  $\mu_{\text{min}}$  als auch das chemische Potential für

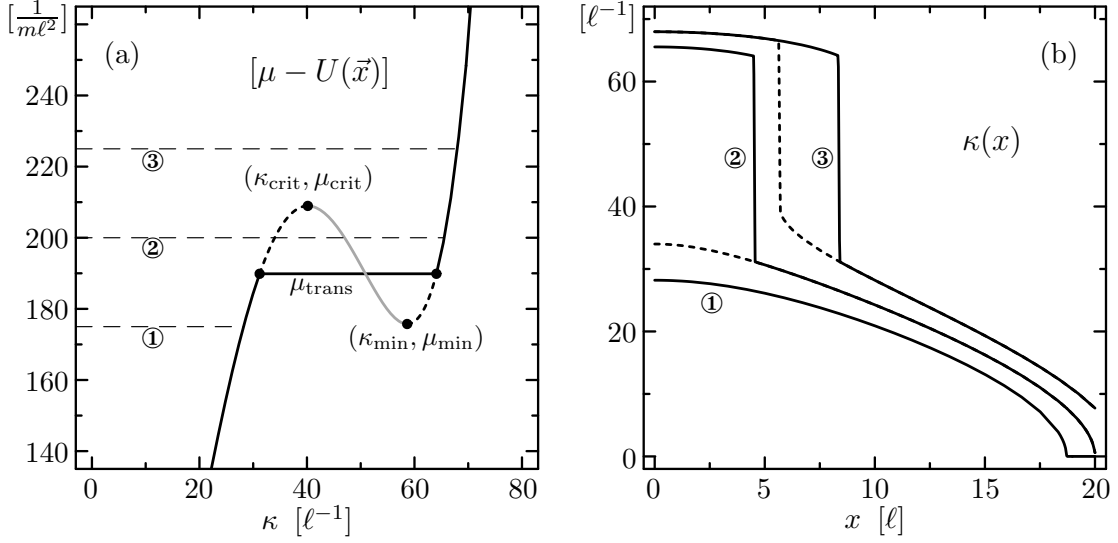


Abbildung 9.12 · (a) Rechte Seite der Extremalbedingung (9.16) für das zweikomponentige Fermigas als Funktion des lokalen Fermiimpulses  $\kappa$  für  $a_0/\ell = -0.05$  und  $a_1/\ell = 0.015$ . Die Lösungen auf den durchgezogenen Segmenten entsprechen absoluten Energieminima, die punktierten Segmente geben lokale Energieminima wieder. (b) Lokale Fermiimpulse als Funktion des Ortes zu den drei in Teilbild (a) durch horizontale Linien markierten chemischen Potentialen. Die durchgezogenen Kurven geben die energieminimale Lösung wieder, die punktierten die metastabile Niederdichtelösung.

den Gleichgewichtsübergang  $\mu_{\text{trans}}$  ab. Für Wechselwirkungen mit

$$\frac{a_1}{|a_0|} < \sqrt[3]{\frac{160}{729\pi^2}} \approx 0.281 \quad (9.24)$$

tritt das Minimum bei negativen chemischen Potentialen auf:  $\mu_{\text{min}} < 0$ . Ein Beispiel für diesen Wechselwirkungstyp gibt die strichpunktierte Kurve in Abbildung 9.11. Hier existieren formal sogar Lösungen der Extremalbedingung zu negativen chemischen Potentialen, die selbstgebundenen Systemen entsprechen. Erreicht das Streulängenverhältnis die Grenze

$$\frac{a_1}{|a_0|} < 0.274, \quad (9.25)$$

dann liegt auch das chemische Potential der Maxwellkonstruktion  $\mu_{\text{trans}}$  bei negativen Werten. Wie im folgenden Abschnitt gezeigt wird, existiert für solche Wechselwirkungen kein metastabiler Hochdichtezustand mehr. Sobald die Stabilitätsbedingung (9.18) verletzt bzw. das kritische Potential  $\mu_{\text{crit}}$  überschritten wird, kollabiert das System.

Zusammengefaßt ergeben sich für anziehende s-Wellen- und abstoßende p-Wellenwechselwirkungen in Abhängigkeit vom Verhältnis der Streulängen  $a_1/|a_0|$  folgende Strukturen der Grundzustandsdichte:

- (I)  $a_1/|a_0| > 0.311$ : Das System ist durch die abstoßende p-Wellenwechselwirkung für beliebige chemische Potentiale, d.h. Teilchenzahlen, stabil. Für Wechselwirkungen in der Nähe der Schranke zeigt sich eine Erhöhung der zentralen Dichte, die das Auftreten der Hochdichtephase ankündigt.

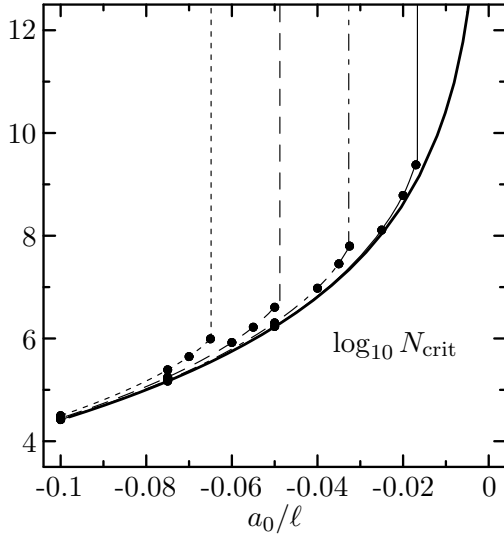


Abbildung 9.13 · Kritische Teilchenzahl entsprechend (9.22) für zweikomponentige Fermigase mit anziehender s-Wellen und abstoßender p-Wellenwechselwirkung. Dargestellt ist der Logarithmus von  $N_{\text{crit}}$  als Funktion der s-Wellenstreuungslänge für verschiedene Werte der p-Wellenstreuungslänge  $a_1/\ell = 0$  (—), 0.005 (---), 0.01 (— · —), 0.015 (····) und 0.02 (— · · ·). Die senkrechten Kurventeile markieren das Einsetzen der absoluten p-Wellenstabilisierung. Die Punkte entstammen der direkten numerischen Rechnung.

- (II)  $0.274 < a_1/|a_0| < 0.311$ : Für chemische Potentiale unterhalb  $\mu_{\text{crit}}$ , d.h. Systemen die der Stabilitätsbedingung (9.18) genügen, existiert die herkömmliche Niederdichtephase. Wird die Stabilitätsbedingung verletzt, so tritt eine p-wellenstabilisierte Hochdichtephase im Zentrum der Falle auf, die ihrerseits metastabil gegen Übergang in den selbstgebundenen Grundzustand ist. Im Bereich  $\mu_{\text{trans}} < \mu < \mu_{\text{crit}}$  kann bereits ein Übergang von der metastabilen Niederdichtelösung zur energetisch bevorzugten Hochdichtelösung erfolgen.
- (III)  $a_1/|a_0| < 0.274$ : Ist die Stabilitätsbedingung (9.18) erfüllt, d.h.  $\mu < \mu_{\text{crit}}$ , so existiert die reguläre metastabile Niederdichtelösung. Oberhalb des kritischen chemischen Potentials kollabiert das System in den absoluten Grundzustand, die Hochdichtephase ist nicht mehr metastabil.

Die Stabilitätsbedingung (9.18) entscheidet bei diesem Wechselwirkungstypus nur über die Existenz einer reinen metastabilen Niederdichtephase. Ist sie erfüllt, so gibt es eine metastabile Niederdichtelösung für jeden Ort in der Falle. Wechselwirkungen der ersten Kategorie erfüllen (9.18) immer. Bei Wechselwirkungen der zweiten Kategorie tritt bei Verletzung der Stabilitätsbedingung eine metastabile Hochdichtephase im Zentrum der Falle auf. In der dritten Kategorie erfolgt der direkte Übergang zu einem selbstgebundenen System.

Wie im vorangehenden Abschnitt wird eine Parametrisierung der Stabilitätsbedingung in der Teilchenzahl angestrebt, das Verfahren ist ganz analog. Es zeigt sich, daß die numerisch bestimmten kritischen Teilchenzahlen  $N_{\text{crit}}$  durch die Parametrisierung (9.22) beschrieben werden können. Im Gegensatz zu den vorher behandelten Wechselwirkungen mit negativer p-Wellenstreuungslänge muß  $\nu = 3$  gewählt werden, um die Bedingung (9.23) für die absolute Stabilisierung, die aus der analytischen Stabilitätsbedingung (9.18) abgeleitet wurde, mit der parametrisierten Stabilitätsbedingung reproduzieren zu können. Der Parameter  $C_0$  ist bereits durch den Grenzfall verschwindender p-Wellenstreuungslänge (9.20) festgelegt, die Anpassung der übrigen Parameter ergibt die in Tabelle 9.1 auf Seite 180 angegebenen Werte. Die Parametrisierung reproduziert die numerisch bestimmten Stabilitätsgrenzen wiederum bis auf Abweichungen weit unter einem Prozent.

In Abbildung 9.13 ist der Logarithmus der kritischen Teilchenzahl, die sich aus

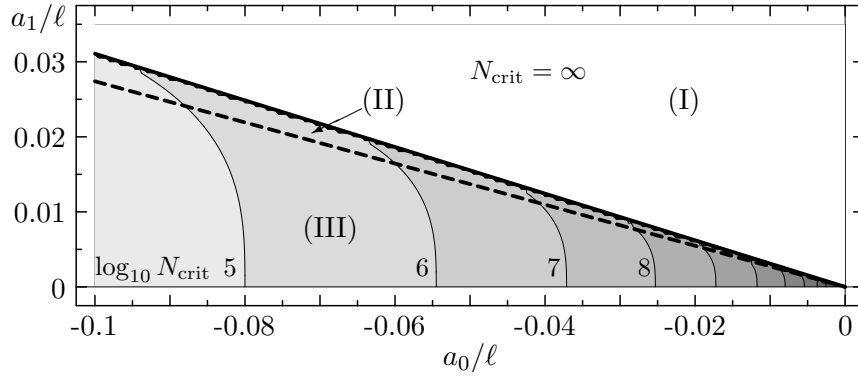


Abbildung 9.14 · „Stabilitätskarte“ für zweikomponentige Fermigase mit anziehender s-Wellen- und abstoßender p-Wellenwechselwirkung. Die Konturgraphik zeigt den Logarithmus der kritischen Teilchenzahl als Funktion der beiden Streulängen  $a_0/\ell$  und  $a_1/\ell$ . Die weiße Fläche kennzeichnet den Bereich unendlicher kritischer Teilchenzahl (I). Im Bereich (II) tritt bei Überschreiten der kritischen Teilchenzahl eine metastabile Hochdichtephase auf, und im Bereich (III) erfolgt der Übergang in den Grundzustand.

der Stabilitätsbedingung ergibt, als Funktion der s-Wellenstreuung für verschiedene Werte der p-Wellenstreuung aufgetragen. Für Wechselwirkungen mit starker s-Wellenanziehung hängt die kritische Teilchenzahl nur unwesentlich von der p-Wellenstreuung ab. Sobald das Streulängenverhältnis jedoch die Bedingung (9.23) der absoluten p-Wellenstabilisierung erfüllt, springt die kritische Teilchenzahl auf unendlich. Insofern hängt die Stabilität des Fermigas sehr stark von der p-Wellenstreuung ab, denn sie entscheidet ob ein System mit anziehender s-Wellenwechselwirkung eine beschränkte Teilchenzahl aufweist oder nicht.

Einen umfassenden Überblick gibt die Darstellung der kritischen Teilchenzahl in Form einer Konturgraphik als Funktion der beiden Partialwellenstreuungen, wie in Abbildung 9.14 gezeigt. Die drei oben diskutierten Wechselwirkungskategorien (I)-(III) sind markiert, die beiden Geraden kennzeichnen die Grenzen (9.23) und (9.25). Bei Wechselwirkungen in den Bereichen (II) und (III) hat die p-Wellenabstoßung kaum Einfluß auf die kritische Teilchenzahl. Es zeigt sich lediglich eine schwache Krümmung der Konturlinien mit zunehmender p-Wellenstreuung. Dafür ist der Effekt der p-Wellenkomponente beim Übergang in den Bereich (I) um so dramatischer: Die kritische Teilchenzahl springt abrupt auf unendlich, sobald Bedingung (9.23) erfüllt ist. Schließlich zeigt die Abbildung, wie klein der Bereich (II) ist, in dem jenseits der kritischen Teilchenzahl die p-wellenstabilisierte Hochdichtephase auftritt.

### 9.4.3 Struktur und Stabilität der Hochdichtephase

Trotz der engen Vorgaben an die Parameter der Wechselwirkungen, soll die Struktur und Stabilität des außergewöhnlichen Zustandes der p-wellenstabilisierten Hochdichtephase hier näher beleuchtet werden.

Zuerst wird ein schematisches Bild der Entstehung der Hochdichtephase entwickelt. Dazu sei ein zweikomponentiges System mit konstanter Wechselwirkung ( $a_0/\ell = -0.05$ ,  $a_1/\ell = 0.015$ ) und wachsender Teilchenzahl betrachtet. In Abbildung 9.15(a) ist der Zusammenhang zwischen Teilchenzahl und chemischem Potential für einen sphärischen harmonischen Oszillator gezeigt. Die beiden Zweige werden von zwei Klassen von Lö-

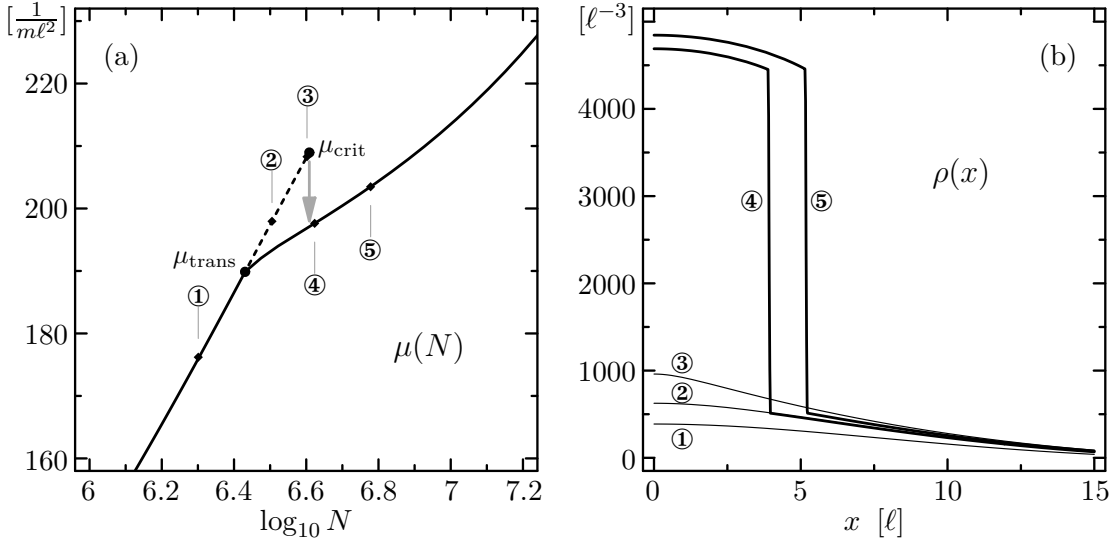


Abbildung 9.15 · (a) Chemisches Potential  $\mu$  in Abhängigkeit von der Teilchenzahl für das zweikomponentige Fermigas mit  $a_0/\ell = -0.05$  und  $a_1/\ell = 0.015$ . Der untere Zweig beschreibt Lösungen, die vollständig auf dem Niederdichtezweig liegen, der obere Zweig solche, die eine Hochdichtephase entsprechend der Maxwellkonstruktion enthalten. Das punktierte Segment stellt eine metastabile Lösung dar. (b) Dichten für die in Teil (a) markierten Lösungen unterhalb (—) bzw. oberhalb (—) der kritischen Teilchenzahl  $N_{\text{crit}} \approx 4 \times 10^6$ .

sungen gebildet. Für  $\mu < \mu_{\text{crit}}$  existiert eine Lösung, die vollständig auf dem Niederdichtezweig (vergleiche Abbildung 9.12) liegt und somit eine glatte, niedrige Dichte in der gesamten Falle aufweist. Die Fälle ①–③ in Abbildung 9.15(b) zeigen Beispiele für diese Lösungsklasse. Oberhalb des chemischen Potentials  $\mu_{\text{trans}}$  existiert eine Lösung der Extremalbedingung auf dem Hochdichtezweig, die lokal einen kleineren Wert der legendretransformierten Energiedichte  $\mathcal{F}[\kappa]$  aufweist. In einem Gleichgewichtszustand wird die Dichte für alle Punkte mit  $[\mu - U(\vec{x})] > \mu_{\text{trans}}$ , also im Zentrum der Falle, vom Hochdichtezweig gebildet. Typische Beispiele zeigen die Fälle ④ und ⑤, die durch eine ausgeprägte Hochdichtephase im Zentrum der Falle gekennzeichnet sind. Für chemische Potentiale zwischen  $\mu_{\text{trans}}$  und  $\mu_{\text{crit}}$  sind beide Lösungsklassen möglich, die Lösung mit Hochdichtephase und die glatte Niederdichtelösung. Wie in der Abbildung durch die punktierte Linie angedeutet, ist die Niederdichtelösung in diesem Bereich nur metastabil, die Hochdichtephase ist energetisch günstiger.

Im Sinne eines Gedankenexperimentes sei ein idealisiertes System mit langsam wachsender Teilchenzahl betrachtet. Für Teilchenzahlen  $N < N_{\text{trans}}$ , wie z.B. in Fall ①, existiert nur die glatte Niederdichtelösung. Erhöht sich die Zahl der Teilchen und erreicht  $N_{\text{trans}}$ , so besteht die Möglichkeit, daß sich im Fallenzentrum die energetisch günstigere Hochdichtephase ausbildet. Es sind allerdings Dichtefluktuationen notwendig, um die Barriere von der Niederdichte- zur Hochdichtelösung zu überwinden. In einem idealisierten Szenario mit minimalen Dichtefluktuationen wird das System im metastabilen Niederdichtezustand bleiben bis die kritische Teilchenzahl  $N_{\text{crit}}$  erreicht ist, wie durch die Fälle ② und ③ gezeigt. Die Barriere für den Übergang in die Hochdichtephase verringert sich mit wachsendem  $N$  und verschwindet bei  $N_{\text{crit}}$  vollständig, so daß spätestens hier eine Hochdichtephase in Erscheinung tritt. Über ihre Ausdehnung entscheidet das

mechanische Druckgleichgewicht an der Grenzfläche. Da der Druck durch

$$-p(\vec{x}) = \mathcal{E}[\kappa](\vec{x}) - \frac{\mu}{3\pi^2} \kappa^3(\vec{x}) = \mathcal{F}[\kappa](\vec{x}) \quad (9.26)$$

gegeben ist, besteht ein Druckgleichgewicht beider Phasen gerade für solche  $[\mu - U(\vec{x})]$ , bei denen die beiden lokalen Minima der transformierten Energiedichte  $\mathcal{F}[\kappa]$  den gleichen Wert haben, also gerade für  $\mu_{\text{trans}}$ . Die Grenzfläche zwischen Hoch- und Niederdichtephase wird von der Hyperfläche  $[\mu - U(\vec{x})] = \mu_{\text{trans}}$  gebildet. Das führt dazu, daß die Hochdichtephase nach der Bildung aus dem metastabilen Niederdichtezustand, sei es durch Überschreiten der kritischen Teilchenzahl oder durch eine Dichtefluktuation im Bereich  $N_{\text{trans}} < N < N_{\text{crit}}$ , eine relativ große Ausdehnung aufweist. Die beiden in Abbildung 9.15(b) gezeigten Fälle ③ bzw. ④ mit Teilchenzahlen knapp unterhalb bzw. knapp oberhalb der kritischen Teilchenzahl  $N_{\text{crit}}$  belegen dies. Der Sprung in der Dichte um eine Größenordnung im Zusammenhang mit der Ausdehnung der Hochdichtephase bewirkt einen sprunghaften Abfall des chemischen Potentials bei konstanter Teilchenzahl, sobald die Hochdichtephase gebildet wird. Die Lösung springt vom metastabilen Niederdichtezweig in Abbildung 9.15(a) auf den Zweig der Hochdichtephase bei kleinerem  $\mu$ . Mit steigender Teilchenzahl wächst die Dichte und der Radius der Hochdichtephase weiter an.

In diesem Bild läßt sich auch der Kollaps des Systems für Wechselwirkungen mit  $a_1/|a_0| < 0.274$  verstehen. Wie oben erwähnt, tritt hier keine stabile Hochdichtephase auf, sondern das System kollabiert bei Überschreiten der kritischen Teilchenzahl  $N_{\text{crit}}$  in einen selbstgebundenen Zustand. Der Grund besteht darin, daß für derartige Wechselwirkungen das chemische Potential  $\mu_{\text{trans}}$  negative Werte annimmt. In der Hochdichtephase bildet zumindest ein Teil des Gases einen selbstgebundenen Mean-Field-Zustand für den das externe Potential nicht mehr relevant ist.<sup>2</sup>

Hier schließt sich die Frage nach der Eignung der effektiven Kontaktwechselwirkung für die Beschreibung der Hochdichtephase an. Es ist offenkundig, daß die Kontaktwechselwirkung per constructionem nicht auf selbstgebundene Systeme anwendbar ist. Aber auch die Beschreibung der Hochdichtephase stößt an die Gültigkeitsgrenzen der effektiven Kontaktwechselwirkung. In Abschnitt 7.3.5 wurde gezeigt, daß die Energien in einem Zweiteilchensystem mit Hilfe der Kontaktwechselwirkung bis zu relativ hohen Werten des Parameters  $q|a_0|$ , wobei  $q$  den Betrag des Zweiteilchen-Relativimpulses bezeichnet, gut beschrieben werden können. Erachtet man 5% relative Abweichung von der exakten Energie als tolerabel, so sind Werte bis zu  $q|a_0| \approx 1.5$  möglich. Für das Vielteilchensystem führt dies auf eine Obergrenze für das Produkt aus Fermiimpuls und Streulänge von  $\kappa|a_0| \lesssim 3$ . Für die in Abbildung 9.11 diskutierten Beispiele mit  $a_0/\ell = -0.05$  gilt eine Grenze von  $\kappa \lesssim 60\ell^{-1}$  für den lokalen Fermiimpuls. Offenbar liegt der Hochdichtezweig bereits für  $a_1/|a_0| \approx 0.3$ , d.h. knapp unterhalb der p-Wellenstreulänge für die er erstmals auftritt, an der Anwendbarkeitsgrenze der Näherung. Für kleinere Streulängenverhältnisse wachsen die Fermiimpulse des Hochdichtezweigs rapide, so daß auf Basis der effektiven Kontaktwechselwirkung keine Aussage über die Struktur der Hochdichtephase gemacht werden kann.

Aus physikalischer Sicht ergeben sich weitere Einschränkungen bezüglich der Stabilität der Hochdichtephase. Der metastabile Zustand des verdünnten Fermigases besitzt

<sup>2</sup>Bezüglich der hier beschriebenen Phänomene sei auf die im Zusammenhang mit dieser Arbeit entstandene Webseite <http://theory.gsi.de/~trap/> verwiesen. Hier finden sich weiterführende Illustrationen zur Entstehung der Hochdichtephase und zum Einfluß der p-Wellenwechselwirkung in zweikomponentigen Fermigasen.



eine begrenzte Lebensdauer, die von der Dichte des System bestimmt wird. Dabei bilden Dreiteilchenkollisionen, bei denen zwei Atome einen gebundenen Zustand (Dimer) bilden und das dritte beteiligte Atom die überschüssige Energie aufnimmt, den dominanten Verlustmechanismus. Typischerweise entweichen alle drei Teilchen in einer derartigen Kollision aus der Falle. Die Rate solcher Dreiteilchenprozesse ist im wesentlichen proportional zur dritten Potenz der Dichte [BeBr00]. Das führt dazu, daß sich die Verlustrate in der Hochdichtephase, die eine um mindestens eine Größenordnung höhere Dichte als die Niederdichtephase aufweist, um mindestens drei Größenordnungen verstärkt. Sobald eine Hochdichtephase auftritt, steigt die Verlustrate im Zentrum der Falle sprunghaft an, und praktisch die gesamte Hochdichtekomponente geht in Zeiten, die mindestens drei Größenordnungen kleiner als die Lebensdauer des Niederdichtezustandes sind, verloren.

#### 9.4.4 Experimentelle Relevanz

Die verschiedenen Phänomene, die sich für attraktive Wechselwirkungen ergeben, eröffnen interessante Fragestellungen für experimentelle Untersuchungen. Zwei Beispiele verdeutlichen dies: Als erstes Beispiel sei ein zweikomponentiges Gas aus  ${}^6\text{Li}$  Atomen in verschiedenen magnetischen Unterzuständen des Gesamtdrehimpulses genannt. Experimentellen Untersuchungen zufolge [AbMc97], besitzt  ${}^6\text{Li}$  eine anomale s-Wellenstreuungslänge von  $a_0 = -2160a_B$ , was auf die Existenz eines schwach gebundenen s-Wellenzustandes hindeutet. In einer sphärischen harmonischen Falle mit typischer Oszillatorlänge  $\ell = 1\mu\text{m}$  entspricht das einem Wechselwirkungsparameter  $a_0/\ell \approx -0.11$ . Unter Vernachlässigung der p-Wellenwechselwirkung, die in diesem Fall ohne weiteres gerechtfertigt ist, ergibt sich aus der Stabilitätsbedingung (9.20) eine kritische Teilchenzahl von  $N_{\text{crit}} = 14800$  für jede der beiden Komponenten. Diese Begrenzung der Teilchenzahl des metastabilen Zustandes stellt eine ernsthafte Einschränkung dar, die unmittelbare experimentelle Relevanz besitzt. Das zweikomponentige  ${}^6\text{Li}$ -System gilt als bevorzugter Kandidat für die Beobachtung des BCS-Phasenübergangs in ultrakalten atomaren Gasen [HoFe97], gerade weil aufgrund der außerordentlich großen s-Wellenstreuungslänge eine relativ hohe Übergangstemperatur in der Größenordnung 10 mK erwartet wird. Desweiteren wurde gezeigt, daß die kritische Temperatur für den BCS-Übergang deutlich mit der Teilchenzahl ansteigt [HoFe97]. Voraussetzung für die Bildung der suprafluiden Phase ist die Stabilität des ultrakalten Fermigases in der Normalphase, somit gilt die strenge Begrenzung der Teilchenzahl durch  $N_{\text{crit}}$ . Die Erzeugung einer suprafluiden Phase im zweikomponentigen  ${}^6\text{Li}$ -System, ist also nur mit kleinen Teilchenzahlen und entsprechend niedrigen kritischen Temperaturen für den BCS-Übergang möglich. Der Vorteil der großen negativen Streulänge wird hierdurch zunichte gemacht.

Ein zweites Beispiel ist das  ${}^{40}\text{K}$ -System. Die experimentelle s-Wellenstreuungslänge weist einen moderaten positiven Wert von  $a_0 = (157 \pm 20)a_B$  auf [DeBo99]. Der interessante Punkt ist eine experimentell nachgewiesene Resonanz im p-Wellenkanal, die zu vergleichsweise hohen Wirkungsquerschnitten für p-Wellenstreuung führt. M. Marinescu und L. You [MaYo98] haben gezeigt, daß es möglich ist, die effektive Stärke der Atom-Atom-Wechselwirkung durch Anlegen eines externen stationären elektrischen Feldes zu beeinflussen. Dazu wird eine Formresonanz induziert, deren Energie von der Stärke des elektrischen Feldes abhängt. Damit kann die Streulänge durch Variation der Feldstärke nahezu beliebig verändert werden. Im  ${}^{40}\text{K}$ -System könnte so die p-Wellenstreuungslänge, durch Ausnutzung der ohnehin vorhandenen Resonanz, auf sehr hohe Werte „einge-

stellt” werden. Alternativ könnte die s-Wellenstreuungslänge durch Konstruktion einer s-Wellenresonanz auf negative Werte modifiziert werden, so daß im Zusammenspiel mit einer moderaten positiven p-Wellenstreuungslänge eine Realisierung der p-wellenstabilisierten Hochdichtephase möglich scheint.

## 9.5 Zweikomponentige Fermigase: Komponentenseparation

Neben dem Kollaps des verdünnten Fermigases in einen selbstgebundenen Zustand ist in einem zweikomponentigen System ein weiterer Strukturübergang möglich. Es handelt sich um den Übergang von einem Fermigas mit zwei identischen *überlappenden* Dichteverteilungen zu einem mit räumlich *separierten* Dichteprofilen der beiden Komponenten. Da sich die beiden Komponenten in der typischen experimentellen Realisation [DeJi99] bezüglich ihrer Drehimpulsprojektion unterscheiden, geht die Komponentenseparation mit einer makroskopischen Magnetisierung einher.

Im Gegensatz zum Kollaps, der durch das Verschwinden des metastabilen Zustandes als Lösung der Extremalbedingung definiert ist, beruht die Beschreibung des Phasenübergangs von identischen zu separierten Dichten auf einem Energieargument: Oberhalb einer gewissen Teilchenzahl ist die separierte Konfiguration energetisch günstiger als die Konfiguration identischer Dichten.

### 9.5.1 Energiedichte und Komponentenseparation

Beim Strukturübergang von einem zweikomponentigen System mit identischen Dichteprofilen zu einem mit separierten Dichten spielen abstoßende Wechselwirkungen, insbesondere im s-Wellenteil, die treibende Rolle. Die Natur dieses Übergangs zeigt sich bereits anhand der allgemeinen Energiedichte (9.12) des zweikomponentigen Systems:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}[\kappa_1, \kappa_2](\vec{x}) = & \frac{U(\vec{x})}{6\pi^2} [\kappa_1^3(\vec{x}) + \kappa_2^3(\vec{x})] \\ & + \frac{1}{20\pi^2 m} [\kappa_1^5(\vec{x}) + \kappa_2^5(\vec{x})] \\ & + \frac{a_0}{9\pi^3 m} \kappa_1^3(\vec{x}) \kappa_2^3(\vec{x}) \\ & + \frac{a_1^3}{30\pi^3 m} [\kappa_1^8(\vec{x}) + \kappa_2^8(\vec{x})] + \frac{a_1^3}{60\pi^3 m} [\kappa_1^3(\vec{x}) \kappa_2^5(\vec{x}) + \kappa_1^5(\vec{x}) \kappa_2^3(\vec{x})]. \end{aligned} \quad (9.12)$$

Der Einfachheit halber wird hier von gleichen Fallenpotentialen  $U(\vec{x}) = U_1(\vec{x}) = U_2(\vec{x})$  für beide Komponenten ausgegangen. Eine eventuell vorhandene Verschiebung der beiden Fallenpotentiale um eine Konstante kann in der Gesamtenergie und den chemischen Potentialen nachträglich berücksichtigt werden. Die auftretenden Terme lassen sich in zwei Gruppen unterteilen: In die Summanden der ersten Spalte geht nur die Summe der lokalen Fermiimpulse beider Komponenten in verschiedenen Potenzen ein — sie werden vom Beitrag des externen Potentials, der kinetischen Energie und einem Teil des Beitrags der p-Wellenwechselwirkung gebildet. In die Terme der zweiten Spalte geht das Produkt der Fermiimpulse der beiden Komponenten ein — diese Kreuzterme werden von der s- und der p-Wellenwechselwirkung erzeugt. Aus Sicht der Dicht-



tefunktionaltheorie entscheidet die Energieminimierung, welche Dichteverteilung den Grundzustand beschreibt.

Die Form des Energiedichtefunktionalen gibt Grund zur Annahme, daß es für stark abstoßende s-Wellenwechselwirkungen energetisch günstiger sein kann, zwei Dichteverteilungen anzunehmen, die sich nur wenig überlappen, d.h. deren Produkt in jedem Punkt klein ist. Im Grenzfall verschwindender Überlappung, d.h.  $\kappa_1(\vec{x})\kappa_2(\vec{x}) = 0$  für alle  $\vec{x}$ , verschwinden alle Terme der zweiten Gruppe, also insbesondere der Beitrag der s-Wellenwechselwirkung, völlig. Die Energiedichte reduziert sich in diesem Fall, der als *separierte Konfiguration* bezeichnet wird, auf

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^{\text{sep}}[\kappa_1, \kappa_2](\vec{x}) &= \frac{U(\vec{x})}{6\pi^2} [\kappa_1^3(\vec{x}) + \kappa_2^3(\vec{x})] + \frac{1}{20\pi^2 m} [\kappa_1^5(\vec{x}) + \kappa_2^5(\vec{x})] \\ &+ \frac{a_1^3}{30\pi^3 m} [\kappa_1^8(\vec{x}) + \kappa_2^8(\vec{x})]. \end{aligned} \quad (9.27)$$

Da die lokalen Fermiimpulse der beiden Komponenten disjunkte Träger haben, kann formal ein Summenfermiimpuls  $\hat{\kappa}(\vec{x}) = \kappa_1(\vec{x}) + \kappa_2(\vec{x})$  eingeführt werden, der auf die Summe der Teilchenzahlen beider Komponenten normiert ist, d.h. unter der Annahme gleicher Teilchenzahlen auf  $2N$ . Für die Gesamtenergie ist es unerheblich, wie der Summenfermiimpuls räumlich auf die beiden Komponenten verteilt wird, solange beide Fermiimpulse auf die Teilchenzahl  $N$  normiert sind. Die Energiedichte reduziert sich so auf die Energiedichte des einkomponentigen Systems (9.1) mit der doppelten Teilchenzahl. Der Summenfermiimpuls  $\hat{\kappa}(\vec{x})$  ist durch die entsprechende Extremalbedingung (9.3) unter der Nebenbedingung, daß die Teilchenzahl  $2N$  beträgt, gegeben.

### 9.5.2 Ein Variationsmodell

Zur Illustration der Komponentenseparation eignet sich ein Variationsmodell, in dem die beiden konkurrierenden Konfigurationen durch einfache Versuchsdichten parametrisiert werden. Für den Fall identischer Dichten der beiden Komponenten bietet sich die aus der wechselwirkungsfreien Lösung abgeleitete Parametrisierung des lokalen Fermiimpulses an:

$$\kappa_1^{\text{ovl}}(\vec{x}) = \kappa_2^{\text{ovl}}(\vec{x}) = \frac{2\sqrt[3]{6N}}{\alpha} \sqrt{1 - (x/\alpha)^2}, \quad (9.28)$$

wie sie bereits in Abschnitt 9.2.1 verwendet wurde. Die Energie, definiert als Integral über die Energiedichte (9.12), läßt sich für diese Parametrisierung analytisch als Funktion des Variationsparameters  $\alpha$ , der Streulängen und der Teilchenzahl darstellen

$$E^{\text{ovl}} = C_u \frac{\alpha^2 N}{\ell^4} + C_t \frac{N^{5/3}}{\alpha^2} + C_0 \frac{a_0 N^2}{\alpha^3} + C_1 \frac{a_1^3 N^{8/3}}{\alpha^5} \quad (9.29)$$

mit den Konstanten

$$C_u = \frac{3}{8m}, \quad C_t = \frac{3(9/2)^{1/3}}{m}, \quad C_0 = \frac{16384}{315\pi^2 m}, \quad C_1 = \frac{262144 \cdot 6^{2/3}}{1925\pi^2 m}. \quad (9.30)$$

Der optimale Parameter  $\alpha$ , der das Minimum der Energie bei gegebener Teilchenzahl und Streulängen beschreibt, ist numerisch leicht zu bestimmen. Die so berechneten Energien stimmen im betrachteten Parameterbereich bis auf wenige Promille mit der exakten Lösung der Extremalbedingung (9.16) für diesen Fall überein.

Für die Beschreibung der zweiten Konfiguration, dem Fall separierter Komponenten, ist eine Erweiterung der Parametrisierung nötig. Eine Möglichkeit ist die Multiplikation der sphärischen Parametrisierung mit einer Stufenfunktion  $\theta(x_3)$  in der  $x_3$ -Koordinate

$$\kappa_1^{\text{sep}}(\vec{x}) = \kappa_2^{\text{sep}}(-\vec{x}) = 2\theta(x_3) \kappa^{\text{ovl}}(\vec{x}). \quad (9.31)$$

Die so entstehenden Dichteprofile sind hauptsächlich in der positiven bzw. negativen Hemisphäre lokalisiert und von einer scharfen Oberfläche in der  $x_1$ - $x_2$ -Ebene begrenzt. Prinzipiell wären beliebige andere räumliche Konfigurationen der separierten Phasen denkbar, solange das Produkt der Dichten beider Komponenten an jedem Ort verschwindet. Die Größe der Oberfläche zwischen den Komponenten hat keinen Einfluß auf die Energie in Thomas-Fermi-Näherung. Werden allerdings Gradientenkorrekturen in das Energiefunktional einbezogen, dann liefern diese Oberflächen einen positiven wenn auch kleinen Energiebeitrag. Daher ist es physikalisch sinnvoll, stets die Konfiguration minimaler Oberfläche für die Separation anzunehmen.

Die Energie der separierten Konfiguration nimmt als Funktion des Variationsparameters  $\alpha$  die einfache Form

$$E^{\text{sep}} = C_u \frac{\alpha^2 N}{\ell^4} + 2^{2/3} C_t \frac{N^{5/3}}{\alpha^2} + \frac{2^{8/3}}{3} C_1 \frac{a_1^3 N^{8/3}}{\alpha^5} \quad (9.32)$$

an. Da die Dichten beider Komponenten nicht überlappen, trägt die s-Wellenkomponente der Wechselwirkung nicht bei. Im Vergleich zur Energie der überlappenden Konfiguration sind die Vorfaktoren der kinetischen Energie und der p-Wellenwechselwirkung modifiziert.

Man vergleiche die Energien der beiden Konfigurationen zunächst ohne Berücksichtigung der p-Wellenwechselwirkung und unter der Annahme, daß die optimalen Variationsparameter  $\alpha$  der beiden Versuchsdichten bei gegebener Teilchenzahl ungefähr gleich sind. Für verschwindende s-Wellenstreuung unterscheiden sich die Energien beider Konfigurationen nur im Koeffizienten der kinetischen Energie, der im separierten Fall um  $2^{2/3}$  größer ist. Die überlappende Konfiguration ist demnach für verschwindende oder schwach abstoßende s-Wellenwechselwirkungen energetisch begünstigt. Bei hinreichend starker s-Wellenabstoßung wird die Differenz der kinetischen Beiträge durch den Wechselwirkungsterm, der nur in der überlappenden Konfiguration beiträgt, kompensiert. Oberhalb einer gewissen s-Wellenstreuung ist die separierte Konfiguration demnach energetisch bevorzugt. Die folgenden beiden Abschnitte gehen detailliert auf den Übergang zwischen überlappender und separierter Konfiguration ein.

An dieser Stelle soll quantitativ auf die Rolle der Gradientenkorrektur und die Anwendbarkeit der Thomas-Fermi-Näherung für diese Untersuchung eingegangen werden. Die Thomas-Fermi-Näherung vernachlässigt alle Terme, die vom Gradienten der Dichte abhängen. Daher stellen nichtstetige Dichten wie (9.31) nur mögliche Lösungen der Thomas-Fermi-Näherung dar. Die Gradiententerme führen zu stetigen Dichteprofilen, da die Energiedichte an den Unstetigkeitsstellen sonst unendlich groß würden. Eine einfache Erweiterung der Versuchsdichte verwendet eine Fermifunktion statt der Stufenfunktion

$$\kappa_1^{\text{fermi}}(\vec{x}) = \kappa_2^{\text{fermi}}(-\vec{x}) = \frac{2}{1 + \exp(x_3/\sigma)} \rho^{\text{ovl}}(\vec{x}). \quad (9.33)$$

Der zusätzliche Variationsparameter  $\sigma$  kontrolliert die Dicke der diffusen Oberfläche und damit die Überlappung der beiden Komponenten. Im Grenzfall  $\sigma \rightarrow 0$  ergeben sich

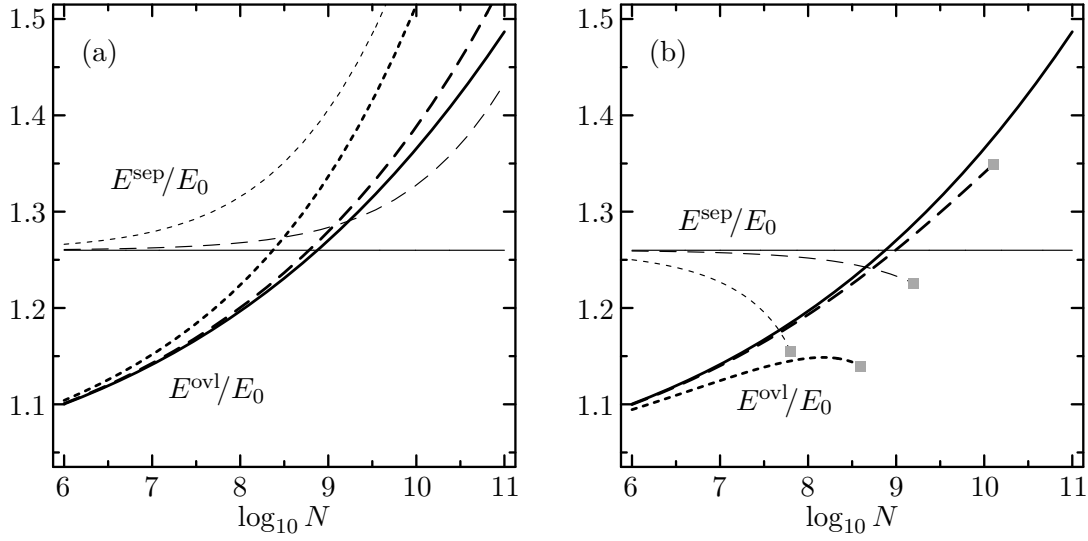


Abbildung 9.16 · Grundzustandsenergie für zweikomponentige Fermigase mit überlappender (dicke Linien) bzw. vollständig separierter Dichte (dünne Linien) als Funktion des Logarithmus der Teilchenzahl für Wechselwirkungen mit abstoßender s-Wellenkomponente  $a_0/\ell = 0.04$  sowie (a) abstoßende p-Wellenkomponente mit  $a_1/\ell = 0$  (—),  $0.01$  (---) und  $0.02$  (·····) bzw. (b) anziehender p-Wellenkomponente mit  $a_1/\ell = 0$  (—),  $-0.01$  (---) und  $-0.023$  (·····). Alle Energien sind auf die Energie  $E_0$  der freien Lösung zur jeweiligen Teilchenzahl normiert.

die vollständig separierten Dichten (9.31), für  $\sigma \rightarrow \infty$  wird die sphärische Verteilung (9.28) reproduziert.

Mit Hilfe dieser Parametrisierung läßt sich die Energieminimierung für die erweiterte Thomas-Fermi-Näherung unter Einbeziehung der Gradientenkorrektur (8.45) durchführen. Die Variation des Radiusparameters  $\alpha$  und der Oberflächendicke  $\sigma$  für verschiedene Werte der Streulänge  $a_0$  führt auf Energien, die praktisch mit dem Ergebnis mit vollständig separierten Dichte (9.32) ohne Berücksichtigung der Gradientenkorrektur übereinstimmen. Der optimale Wert des Oberflächenparameters hängt nur sehr schwach von der Wechselwirkungsstärke ab und beträgt  $\sigma/\alpha \approx 10^{-3}$  bei typischen Teilchenzahlen. Der Beitrag der Gradientenkorrektur zur Energie ist trotz dieser scharf begrenzten Oberfläche minimal:  $E_{\nabla}/E_0 \lesssim 10^{-5}$ . Ein wesentlicher Beitrag stammt hierbei von der äußeren Oberfläche und nicht von der Grenzfläche zwischen den Komponenten. Die Gradientenkorrektur und die diffuse Trennung zwischen den Komponenten sind für die Berechnung der Energie der separierten Phase somit vernachlässigbar.

### 9.5.3 Systematik der Komponentenseparation

Das Variationsmodell kann genutzt werden, um die Systematik der Komponentenseparation in Abhängigkeit von der Wechselwirkungsstärke, d.h. der s- und p-Wellenstreuungslänge, zu studieren. Hier wird sich eine sehr detailreiche Struktur zeigen, die sehr sensitiv vom Zusammenspiel der s- und p-Wellenwechselwirkung abhängt. Naiv erwartet man für alle Wechselwirkungen mit abstoßendem s- oder p-Wellenteil das Auftreten der Komponentenseparation, da in allen Fällen eine abstoßende Wechselwirkung zwischen den beiden Komponenten des Systems wirkt. Diese Erwartung wird sich allerdings als falsch herausstellen.

Sei zuerst der Fall abstoßender s-Wellenwechselwirkungen betrachtet. In Abbildung 9.16 sind die minimierten Energien der überlappenden Konfiguration  $E^{\text{ovl}}$  und der separierten Konfiguration  $E^{\text{sep}}$  über dem Logarithmus der Teilchenzahl für abstoßende s-Wellenwechselwirkungen mit verschiedenen p-Wellenwechselwirkungen aufgetragen. Für verschwindende p-Wellenwechselwirkung (durchgezogene Linien) ist die Energie der vollständig separierten Konfiguration proportional zur Energie des wechselwirkungsfreien Systems, d.h.  $E^{\text{sep}}/E_0$  ist eine Konstante. Nur die kinetische Energie und das externe Potential liefern in dieser Konfiguration einen Energiebeitrag, die abstoßende s-Wellenwechselwirkung wegen der verschwindenden Überlappung der beiden Komponenten nicht. Nichtsdestotrotz liegt die Energie der separierten Konfiguration über der Energie des wechselwirkungsfreien Systems gleicher Teilchenzahl, da die Dichte und die kinetische Energie aufgrund der Lokalisierung aller Teilchen einer Komponente in einer Hälfte der Falle wesentlich höher sind. Die skalierte Energie  $E^{\text{ovl}}/E_0$  der Konfiguration mit identischen Dichten wächst dagegen aufgrund der repulsiven s-Wellenwechselwirkung mit der Teilchenzahl. Der Schnittpunkt beider Kurven definiert eine kritische Teilchenzahl  $N_{\text{sep}}$  für die Komponentenseparation in einem Gleichgewichtssystem. Unterhalb der kritischen Teilchenzahl ist die Konfiguration überlappen der Dichten energetisch bevorzugt, oberhalb von  $N_{\text{sep}}$  diejenige separierter Dichten.

Eine abstoßende p-Wellenwechselwirkung liefert in beiden Konfigurationen einen positiven Beitrag zur Energie, der stark mit der Teilchenzahl anwächst (siehe gestrichelte und punktierte Linien). Die analytische Form der Energien (9.29) bzw. (9.32) zeigt, daß der p-Wellenbeitrag in der separierten Konfiguration mit größerem Gewicht eingeht. Dies führt dazu, daß die Energie der separierten Konfiguration oberhalb einer charakteristischen p-Wellenstreulänge für beliebige Teilchenzahlen über der Energie der überlappenden Konfiguration liegt. Demzufolge tritt keine Komponentenseparation mehr auf. Die abstoßende p-Wellenwechselwirkung stabilisiert das System gegenüber der durch die abstoßende s-Wellenwechselwirkung induzierten Komponentenseparation. Die punktierten Kurven in Abbildung 9.16(a) zeigen den Fall einer p-Wellenwechselwirkung, die gerade stark genug ist, eine derartige Stabilisierung zu bewirken. Die entscheidende Größe ist das Verhältnis von p- und s-Wellenstreulänge — in diesem Beispiel  $a_1/a_0 = 1/2$ . Für Wechselwirkungen mit einem kleineren Streulängenverhältnis, die noch keine absolute Stabilisierung zeigen, wird die kritische Teilchenzahl  $N_{\text{sep}}$  für die Komponentenseparation durch die abstoßende p-Wellenkomponente leicht erhöht. Wie die gestrichelten Kurven der Abbildung 9.16(a) zeigen, ist der Einfluß aber minimal.

Für anziehende p-Wellenwechselwirkungen tritt ein weiterer Effekt in Erscheinung: Die Teilchenzahlen der überlappenden und der separierten Konfiguration werden durch die kritischen Teilchenzahlen für den Kollaps des Fermigases in einen Hochdichtezustand begrenzt. Diese Grenze liegt in der gleichen Größenordnung wie die kritische Teilchenzahl für die Separation. In Abbildung 9.16(b) sind die Energien beider Konfigurationen für abstoßende s-Wellen- und anziehende p-Wellenwechselwirkungen gezeigt. Die Quadrate kennzeichnen die kritischen Teilchenzahlen für den Kollaps des Systems in einen Hochdichtezustand. Allgemein zeigt sich, daß eine anziehende p-Wellenwechselwirkung eine Absenkung der Energien beider Konfigurationen bewirkt, die mit wachsender Teilchenzahl und wachsendem Betrag der Streulänge zunimmt. Für schwache p-Wellenkomponenten senkt sich die kritische Teilchenzahl  $N_{\text{sep}}$  für die Komponentenseparation ab, allerdings sinkt gleichzeitig auch die kritische Teilchenzahl für den Kollaps. Wie die punktierten Kurven der Abbildung zeigen, tritt ab einer gewissen negativen p-Wellenstreulänge der Fall ein, daß keine kritische Teilchenzahl  $N_{\text{sep}}$

mehr definiert werden kann, da die separierte Konfiguration vor Erreichen der Energiegleichheit kollabiert. Für solche Wechselwirkungen existiert keine metastabile separierte Phase. Das Gas kann lediglich in einem metastabilen Zustand mit identischen Dichten existieren, der oberhalb einer entsprechenden kritischen Teilchenzahl ebenfalls kollabiert.

Schließlich bleiben noch Wechselwirkungen mit abstoßender p-Wellen- und anziehender oder verschwindender s-Wellenkomponente zu diskutieren. In solchen Systemen hat die überlappende Phase in jedem Fall eine niedrigere Energie, da die abstoßende p-Wellenkomponente mit geringerem Gewicht eingeht und zudem die anziehende s-Wellenkomponente aktiv ist. Eine Komponentenseparation kann allein durch eine abstoßende p-Wellenwechselwirkung nicht verursacht werden. Vielmehr ist hierfür eine s-Wellenabstoßung zwingend notwendig.

Zusammengefaßt: Eine metastabile separierte Phase tritt nur für abstoßende s-Wellenwechselwirkungen mit betragsmäßig kleinem p-Wellenteil auf. Für stärkere p-Wellenabstoßung ist die separierte Phase energetisch immer oberhalb der Konfiguration mit identischen Dichten, für stärkere p-Wellenanziehung kollabiert das System.

### 9.5.4 Separationsbedingungen

Man kann noch einen Schritt weiter gehen und explizite Separationsbedingungen für den Übergang von der überlappenden zur separierten Phase konstruieren. Dazu wird auf die direkte numerische Lösung der Extremalbedingungen und die damit berechneten Energien für beide Konfigurationen zurückgegriffen. Zuerst wird für ein gegebenes chemisches Potential die Teilchenzahl und die Energie der überlappenden Konfiguration ermittelt. Danach wird das chemische Potential der separierten Konfiguration so angepaßt, daß die Teilchenzahl der überlappenden Konfiguration entspricht. Ist dies der Fall, wird die Energie der separierten Konfiguration bestimmt. Der Vergleich der beiden Energien gibt Aufschluß darüber, ob die betrachtete Teilchenzahl oberhalb oder unterhalb der kritischen Teilchenzahl für die Komponentenseparation liegt. Dieses Verfahren wird im Sinne einer Iterationsprozedur wiederholt, bis die Energie der beiden Konfigurationen bis auf relative Abweichungen von höchstens einem Promille gleich ist.

Die resultierenden kritischen Teilchenzahlen  $N_{\text{sep}}$  werden verwendet, um eine parametrisierte Stabilitätsbedingung in Abhängigkeit von der Teilchenzahl, der Oszillatorlänge und den Streulängen zu konstruieren. Hier erweist sich die Parametrisierung

$$C_0 \left( \sqrt[6]{N} \frac{a_0}{\ell} \right) + C_1^3 \left( \sqrt[6]{N} \frac{a_1}{\ell} \right)^3 \leq 1 \quad (9.34)$$

ohne den in (9.22) eingeführten Kreuzterm als vollkommen ausreichend. Der Parameter  $C_0$  wird durch Anpassung an die kritischen Teilchenzahlen  $N_{\text{sep}}$  für eine reine abstoßende s-Wellenwechselwirkung bestimmt. Der Parameter  $C_1$  ist sodann für abstoßende und anziehende p-Wellenkomponenten separat zu bestimmen. Die Ergebnisse dieser Anpassung sind in Tabelle 9.2 zusammengefaßt. Die direkt bestimmten kritischen Teilchenzahlen werden damit bis auf Abweichungen von 1% reproduziert.

In Abbildung 9.17 ist der Logarithmus der kritischen Teilchenzahl  $N_{\text{sep}}$ , die sich aus der Separationsbedingung ergibt, als Funktion der s-Wellenstreulänge für abstoßende bzw. anziehende p-Wellenwechselwirkungen aufgetragen. Hier sind mehrere charakteristische Phänomene zu beobachten:

Für abstoßende p-Wellenwechselwirkungen existiert eine untere Grenze für die s-Wellenstreulänge, unterhalb derer keine Komponentenseparation auftritt, d.h.  $N_{\text{sep}} \rightarrow \infty$ .

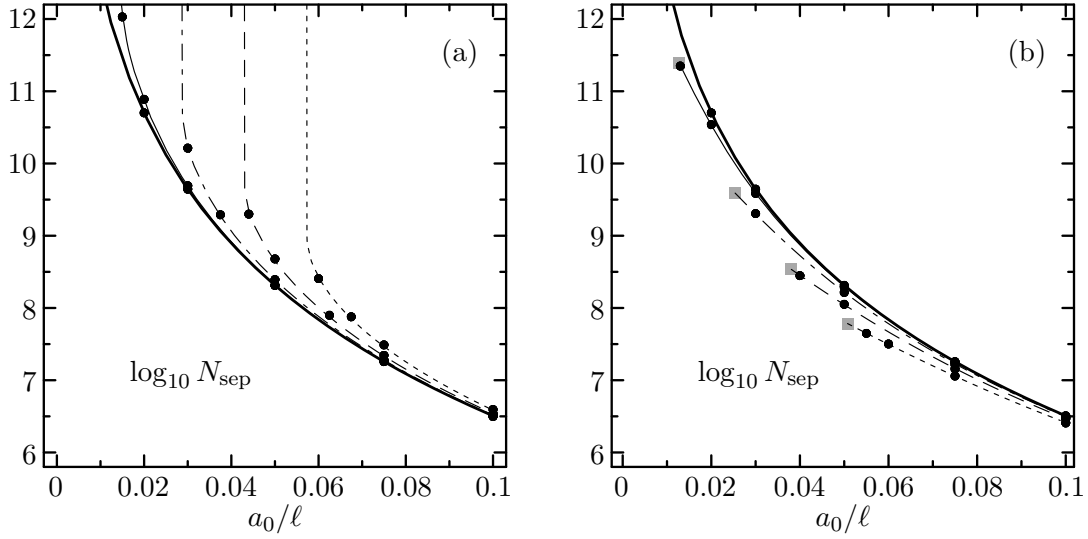


Abbildung 9.17 · Logarithmus der kritischen Teilchenzahl für die Komponentenseparation als Funktion der s-Wellenstreuungslänge  $a_0/\ell$  für (a) abstoßende p-Wellenwechselwirkungen  $a_1/\ell = 0$  (—), 0.005 (—), 0.01 (---), 0.015 (---) und 0.02 (-----) bzw. (b) anziehende p-Wellenwechselwirkungen  $a_1/\ell = 0$  (—),  $-0.005$  (—),  $-0.01$  (---),  $-0.015$  (---) und  $-0.02$  (-----). Die Punkte entstammen der direkten numerischen Rechnung, die Kurven geben das Resultat der Separationsbedingung (9.34) wieder. Die grauen Quadrate in (b) geben den Schnittpunkt mit der Stabilitätsgrenze des separierten Systems an.

Aus der Separationsbedingung ergibt sich, daß keine Komponentenseparation auftritt sofern die Streulängen der Bedingung

$$\frac{a_1}{a_0} > 0.349 \quad (9.35)$$

genügen. Abstoßende p-Wellenwechselwirkungen bewirken also eine Stabilisierung des Systems gegenüber Komponentenseparation, die von der abstoßenden s-Wellenwechselwirkung induziert wird. Die Ursache hierfür wurde bereits im Rahmen des Variationsmodells diskutiert: Die abstoßende p-Wellenwechselwirkung trägt auch in der separierten Konfiguration bei und führt dazu, daß deren Energie für beliebige Teilchenzahlen oberhalb der überlappenden Konfiguration liegt. Auch für Wechselwirkungen, bei denen die Separation auftritt, bewirkt die p-Wellenabstoßung eine leichte Erhöhung der kritischen Teilchenzahl.

Für anziehende p-Wellenwechselwirkungen zeigt sich ein sehr kompliziertes Szenario, da es zur Überlagerung zwischen Separation und Kollaps kommt. Für starke s-Wellenabstoßungen bewirkt die anziehende p-Wellenkomponente eine Reduktion von  $N_{\text{sep}}$ , da sie die Energie der separierten Konfiguration stärker absenkt. Für schwache s-Wellenabstoßung wird der durch die p-Wellenanziehung induzierte Kollaps des Systems

Wechselwirkung	$C_0$	$C_1$
$a_0 > 0, a_1 = 0$	0.823	—
$a_0 > 0, a_1 \geq 0$	0.823	-1.246
$a_0 > 0, a_1 \leq 0$	0.823	-1.401

Tabelle 9.2 · Koeffizienten der parametrisierten Separationsbedingung (9.34) für das zweikomponentige Fermigas für die verschiedenen Wechselwirkungstypen.



relevant. Für Streulängenverhältnisse

$$\frac{|a_1|}{a_0} > 0.394 \quad (9.36)$$

existiert keine metastabile separierte Konfiguration mehr. Sollte das System durch eine Dichtefluktuations eine separierte Phase ausbilden, so würden diese unmittelbar in einen selbstgebundenen Hochdichtezustand kollabieren. Die Teilchenzahlen, oberhalb derer keine metastabile separierte Konfiguration mehr existiert — und demnach keine kritische Teilchenzahl  $N_{\text{sep}}$  definiert werden kann — sind in Abbildung 9.17(b) durch graue Quadrate markiert.

### 9.5.5 Separation versus Kollaps

Dieser Abschnitt soll die Effekte, die sich aus dem Zusammenspiel zwischen Komponentenseparation und der Instabilität der separierten bzw. überlappenden Phase ergeben, genauer beleuchten.

Als Vorbereitung sei der einfache Fall rein abstoßender s- und p-Wellenwechselwirkungen betrachtet. In Abbildung 9.18(a) ist ein „Phasendiagramm“ für das zweikomponentige Fermigas mit einer charakteristischen p-Wellenstreulänge ( $a_1/\ell = 0.01$ ) als Funktion der Teilchenzahl und s-Wellenstreulänge dargestellt. Für derartige Wechselwirkungen kann das System im Rahmen der Thomas-Fermi-Näherung in zwei verschiedenen Zuständen auftreten: identische überlappende Dichten oder separierte Komponenten. Beide Zustände existieren für beliebige Teilchenzahlen und Wechselwirkungsstärken, ihre Energien unterscheiden sich jedoch in Abhängigkeit von diesen Parametern. Daraus ergeben sich zwei Regionen im Phasendiagramm des Gleichgewichtssystems:

- (I) Die Konfiguration identischer Dichten für beide Komponenten ist energetisch gegenüber dem separierten Zustand bevorzugt und bildet den Grundzustand des Gleichgewichtssystems.
- (II) Der Zustand separierter Komponenten ist energetisch bevorzugt und bildet den Grundzustand des Gleichgewichtes. Die Konfiguration überlappender Dichten tritt allenfalls metastabil (gegen Separation der Komponenten) auf.

Die Grenze zwischen beiden Bereichen ist durch die Separationsbedingung (9.34) definiert und durch die strichpunktierte Kurve in Abbildung 9.18 dargestellt.

Das Phasendiagramm in Gegenwart anziehender p-Wellenwechselwirkungen, in Abbildung 9.18(b) exemplarisch  $a_1/\ell = -0.02$ , ist um einiges komplexer. Neben der Komponentenseparation spielt hier der Kollaps des Fermigases in einen selbstgebundenen Zustand eine entscheidende Rolle. Sowohl die überlappende als auch die separierte Konfiguration kann unter Einwirkung der p-Wellenanziehung instabil gegen diesen Kollaps sein. Wie bereits erwähnt, gelten für beide Konfigurationen verschiedene Stabilitätsbedingungen: Die Stabilitätsgrenze der separierten Konfiguration ist in Abbildung 9.18(b) durch die gestrichelte Linie dargestellt, die der überlappenden Konfiguration durch die durchgezogene Linie. Mit wachsender Teilchenzahl wird die separierte Konfiguration früher instabil als die überlappende, daher existiert eine Region im Phasendiagramm, in der nur die überlappende Phase existiert. Im einzelnen ergeben sich folgende zusätzliche Bereiche

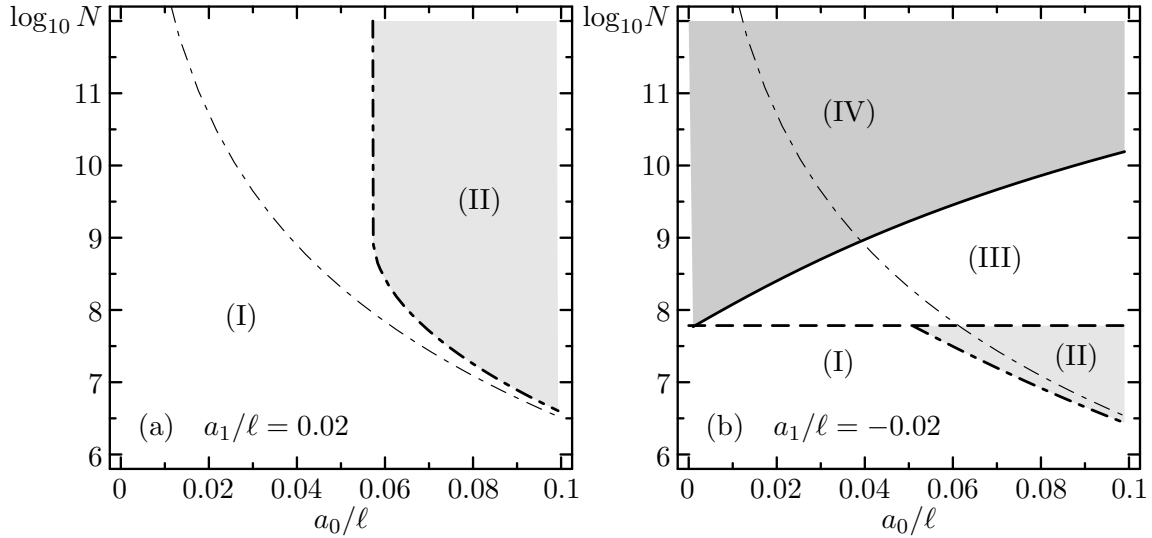


Abbildung 9.18 · Phasendiagramm für das zweikomponentige Fermigas mit abstoßender s-Wellenwechselwirkung und abstoßender (a) bzw. anziehender p-Wellenwechselwirkung (b). Die Linien geben die kritischen Teilchenzahlen für den Kollaps des Systems mit identischen Dichten (—), den Übergang zu separierten Komponenten (·-·-·) sowie den Kollaps der separierten Phase (- - -) an. Zum Vergleich ist die kritische Teilchenzahl für die Komponentenseparation (---) bei verschwindender p-Wellenwechselwirkung angegeben. Die Struktur des Systems in den verschiedenen Regionen des Phasendiagramms wird im Text diskutiert.

- (III) Der Zustand separierter Komponenten ist instabil gegen den Kollaps in einen selbstgebundenen Zustand, nur die Konfiguration überlappender Dichten ist metastabil (gegen Kollaps).
- (IV) Das zweikomponentige Fermigas ist für beide Konfigurationen instabil und kollabiert in einen Bindungszustand.

Diese Phasendiagramme geben einen Eindruck von der Vielfalt der Phänomene, die sich durch Einbeziehung der p-Wellenwechselwirkung eröffnet. Sie zeigen gleichzeitig, daß man bei Vernachlässigung des p-Wellenteils Gefahr läuft, einige wesentliche Eigenschaften des Systems zu übersehen. Ein Beispiel: Gegeben sei ein zweikomponentiges System mit Streulängen  $a_0/\ell = 0.08$  und  $a_1/\ell = -0.02$ . Betrachtet man das Phasendiagramm 9.18(b) so durchläuft das System mit wachsender Teilchenzahl alle beschriebenen Bereiche: Bei kleinen Teilchenzahlen zeigt es überlappende identische Dichteverteilungen (I). Für größere Teilchenzahlen schließt sich ein Bereich (II) an, in dem es energetisch günstiger ist, die beiden Komponenten zu separieren. Wenn dieser Übergang erfolgt, dann kollabiert das System beim Erreichen des Bereiches (III). Falls die Komponentenseparation ausbleibt und sich das System metastabil durch den Bereich (II) entwickelt, dann tritt der Kollaps erst bei um zwei Größenordnungen höheren Teilchenzahlen mit Erreichen des Bereiches (IV) ein. Bei Vernachlässigung der relativ schwachen p-Wellenwechselwirkung würde dieses komplexe Wechselspiel zwischen Separation und Kollaps vollkommen verborgen bleiben.<sup>3</sup>

<sup>3</sup>Zum Phasendiagramm des zweikomponentigen Fermigases sowie dessen Abhängigkeit von der p-Wellenstreulänge finden sich weitergehende Illustrationen auf der Webseite <http://theory.gsi.de/~trap/>. Insbesondere werden anhand zweier Animationen die grundlegenden Veränderungen des Phasendiagramms unter dem Einfluß anziehender bzw. abstoßender p-Wellenwechselwirkungen demonstriert.



## Anhang A

---

### *Ergänzungen zu Teil I*

#### *A.1 Fermigas*

An dieser Stelle sollen Erwartungswerte einiger relevanter Operatoren für den Grundzustand des Fermigases abgeleitet werden. Die Einteilchenzustände sind durch ebene Wellen mit Impulsquantenzahlen  $\vec{k}$  gegeben

$$\langle \vec{x} | \vec{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i \vec{k} \vec{x}), \quad (\text{A.1})$$

der Vielteilchenzustand durch die Slaterdeterminante aller Einteilchenzustände mit Impulsen bis zum Fermiimpuls  $k_F$ .

##### *A.1.1 Integrale über die Fermikugel*

Zuerst seien einige benötigte Impulsintegrale aufgelistet. Die Integrationen erstrecken sich immer über die Fermikugel, d.h. der Betrag des Impulses muß kleiner oder gleich dem Fermiimpuls  $k_F$  sein.

$$\int d^3k \, 1 = \frac{4\pi}{3} k_F^3 \quad (\text{A.2})$$

$$\int d^3k \, k^2 = \frac{4\pi}{5} k_F^5 \quad (\text{A.3})$$

$$\int d^3k \, (\vec{k} \vec{n}_r) = 0 \quad (\text{A.4})$$

$$\int d^3k \, (\vec{k} \vec{n}_r)^2 = \frac{4\pi}{15} k_F^5 \quad (\text{A.5})$$

$$\int d^3k \, \exp(\pm i \vec{k} \vec{r}) = 4\pi \, k_F^3 \, \frac{j_1(x)}{x} \quad (\text{A.6})$$

$$\int d^3k \vec{k} \exp(\pm i \vec{k} \vec{r}) = \pm 4\pi i k_F^4 \left( -\frac{j_0(x)}{x} + \frac{3j_1(x)}{x^2} \right) \vec{n}_r \quad (\text{A.7})$$

$$\int d^3k \vec{k}^2 \exp(\pm i \vec{k} \vec{r}) = 4\pi k_F^5 \left( \frac{2j_0(x)}{x^2} + \left[ \frac{1}{x} - \frac{6}{x^3} \right] j_1(x) \right) \quad (\text{A.8})$$

$$\int d^3k (\vec{k} \vec{n}_r) \exp(\pm i \vec{k} \vec{r}) = \pm 4\pi i k_F^4 \left( -\frac{j_0(x)}{x} + \frac{3j_1(x)}{x^2} \right) \quad (\text{A.9})$$

$$\int d^3k (\vec{k} \vec{n}_r)^2 \exp(\pm i \vec{k} \vec{r}) = 4\pi k_F^5 \left( \frac{4j_0(x)}{x^2} + \left[ \frac{1}{x} - \frac{12}{x^3} \right] j_1(x) \right) \quad (\text{A.10})$$

In allen Gleichung wird die Abkürzung  $x = k_F r$  verwendet.

### A.1.2 Erwartungswerte im Fermigas

Nun werden die Erwartungswerte einiger Operatoren für den Fermigas-Grundzustand abgeleitet. Dabei werden die Einteilchenzustände allein durch eine Impulsquantenzahl gekennzeichnet, Spin und Isospin sind hier nicht berücksichtigt. Die Erwartungswerte unter Einbeziehung weiterer diskreter Quantenzahlen lassen sich aber leicht auf die hier gezeigten Relationen zurückführen.

Bei der Berechnung wird vom Kontinuumslimites zur Umformung der Summe über alle Impulszustände bis zur Fermikante in ein Integral über die Fermikugel Gebrauch gemacht

$$\sum_{\vec{k}_i}^{k_F} \dots \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int^{k_F} d^3k \dots \quad (\text{A.11})$$

Die Summations- bzw. Integrationsgrenzen werden im folgenden nicht mehr ausgeschrieben, im Falle der Impulsvariablen erstreckt sich die Integration immer über die Fermikugel, für die Ortsvariablen über den gesamten Raum.

Zuerst wird der Erwartungswert des Operators des Impulsquadrates  $\vec{p}^2$ , d.h. im wesentlichen der kinetischen Energie, betrachtet. Es gilt unter Zuhilfenahme von (A.3):

$$\begin{aligned} \langle \vec{p}^2 \rangle &= \sum_{\vec{k}} \langle \vec{k} | \vec{p}^2 | \vec{k} \rangle = \sum_{\vec{k}} \vec{k}^2 \langle \vec{k} | \vec{k} \rangle \\ &= \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k \vec{k}^2 = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{5} k_F^5 \\ &= \frac{V}{10\pi^2} k_F^5. \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Die Erwartungswerte von Zweiteilchenoperatoren werden zweckmäßiger Weise in einen direkten und einen Austauschterm zerlegt

$$\langle \circ \rangle = \langle \circ \rangle_{\text{di}} + \langle \circ \rangle_{\text{xc}}. \quad (\text{A.13})$$

Zunächst zum Erwartungswert einer lokalen Operatorfunktion  $f(\mathbf{r})$  der Relativkoordinate, z.B. eines lokalen Potentials. Für den direkten Term folgt mit (A.2)

$$\begin{aligned}
\langle f(\mathbf{r}) \rangle_{\text{di}} &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | f(\mathbf{r}) | \vec{k}_1 \vec{k}_2 \rangle \\
&= \frac{1}{2} \int d^3X d^3r f(r) \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} |\langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | \vec{k}_1 \vec{k}_2 \rangle|^2 \\
&= \frac{V}{2(2\pi)^6} \int d^3r f(r) \int d^3k_1 d^3k_2 1 \\
&= \frac{V}{2(2\pi)^6} \left( \frac{4\pi}{3} k_F^3 \right)^2 \int d^3r f(r) \\
&= \frac{V}{72\pi^4} k_F^6 \int d^3r f(r).
\end{aligned} \tag{A.14}$$

Die Einteilchenkoordinaten verstehen sich hier und im folgenden in der Darstellung durch Schwerpunkts- und Relativkoordinate im Zweiteilchensystem:  $\vec{x}_1 = \vec{X} + \vec{r}/2$ ,  $\vec{x}_2 = \vec{X} - \vec{r}/2$ . Für den Austauschterm ergibt sich mit (A.6)

$$\begin{aligned}
\langle f(\mathbf{r}) \rangle_{\text{xc}} &= -\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | f(\mathbf{r}) | \vec{k}_2 \vec{k}_1 \rangle \\
&= -\frac{1}{2} \int d^3X d^3r f(r) \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | \vec{x}_1 \vec{x}_2 \rangle \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | \vec{k}_2 \vec{k}_1 \rangle \\
&= -\frac{V}{2(2\pi)^6} \int d^3r f(r) \int d^3k_1 d^3k_2 \exp(-i\vec{k}_1 \vec{r}) \exp(i\vec{k}_2 \vec{r}) \\
&= -\frac{V}{2(2\pi)^6} (4\pi k_F^3)^2 \int d^3r f(r) \left( \frac{j_1(k_F r)}{k_F r} \right)^2 \\
&= -\frac{V}{72\pi^4} k_F^6 \int d^3r f(r) l_1^2(k_F r),
\end{aligned} \tag{A.15}$$

dabei bezeichnet  $l_1(x)$  die sogenannte Slaterfunktion

$$l_1(x) = 3 \frac{j_1(x)}{x}. \tag{A.16}$$

Als nächstes sei der Erwartungswert eines doppelten Gradientenoperators der Form  $\vec{\mathbf{q}} f(\mathbf{r}) \vec{\mathbf{q}}$  betrachtet, wobei  $\vec{\mathbf{q}} = \frac{1}{2}(\vec{\mathbf{p}}(1) - \vec{\mathbf{p}}(2))$  den Operator des Relativimpulses beschreibt. Er tritt zum Beispiel im Gradiententeil der effektiven Massenkorrektur auf.

Für den direkten Term folgt mit (A.2), (A.3) und (A.4)

$$\begin{aligned}
 \langle \vec{\mathbf{q}} f(\mathbf{r}) \vec{\mathbf{q}} \rangle_{\text{di}} &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | \vec{\mathbf{q}} f(\mathbf{r}) \vec{\mathbf{q}} | \vec{k}_1 \vec{k}_2 \rangle \\
 &= \frac{1}{2} \int d^3X d^3r f(r) \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} |\langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | \vec{\mathbf{q}} | \vec{k}_1 \vec{k}_2 \rangle|^2 \\
 &= \frac{V^3}{2(2\pi)^6} \int d^3r f(r) \int d^3k_1 d^3k_2 \frac{1}{4} (\vec{k}_1 - \vec{k}_2)^2 |\langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | \vec{k}_1 \vec{k}_2 \rangle|^2 \\
 &= \frac{V}{8(2\pi)^6} \int d^3r f(r) \int d^3k_1 d^3k_2 (\vec{k}_1^2 + \vec{k}_2^2 - 2\vec{k}_1 \vec{k}_2) \\
 &= \frac{V}{8(2\pi)^6} 2 \left( \frac{4\pi}{5} k_F^5 \right) \left( \frac{4\pi}{3} k_F^3 \right) \int d^3r f(r) \\
 &= \frac{V}{240\pi^4} k_F^8 \int d^3r f(r).
 \end{aligned} \tag{A.17}$$

Für den Austauschterm ergibt sich mit (A.6), (A.7) und (A.8)

$$\begin{aligned}
 \langle \vec{\mathbf{q}} f(\mathbf{r}) \vec{\mathbf{q}} \rangle_{\text{xc}} &= -\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | \vec{\mathbf{q}} f(\mathbf{r}) \vec{\mathbf{q}} | \vec{k}_2 \vec{k}_1 \rangle \\
 &= -\frac{1}{2} \int d^3X d^3r f(r) \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | \vec{\mathbf{q}} | \vec{x}_1 \vec{x}_2 \rangle \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | \vec{\mathbf{q}} | \vec{k}_2 \vec{k}_1 \rangle \\
 &= -\frac{V^3}{2(2\pi)^6} \int d^3r f(r) \int d^3k_1 d^3k_2 \times \\
 &\quad \times \frac{-1}{4} (\vec{k}_1 - \vec{k}_2)^2 \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | \vec{x}_1 \vec{x}_2 \rangle \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | \vec{k}_2 \vec{k}_1 \rangle \\
 &= \frac{V}{8(2\pi)^6} \int d^3r f(r) \int d^3k_1 d^3k_2 \times \\
 &\quad \times (\vec{k}_1^2 + \vec{k}_2^2 - 2\vec{k}_1 \vec{k}_2) \exp(-i\vec{k}_1 \vec{r}) \exp(i\vec{k}_2 \vec{r}) \\
 &= \frac{V}{8(2\pi)^6} \int d^3r f(r) \left\{ 2 \left( 4\pi k_F^3 \frac{j_1(k_F r)}{k_F r} \right) \times \right. \\
 &\quad \times \left( 4\pi k_F^5 \left[ \frac{2j_0(k_F r)}{(k_F r)^2} + \left( \frac{1}{k_F r} - \frac{6}{(k_F r)^3} \right) j_1(k_F r) \right] \right) \\
 &\quad \left. - 2 \left( 4\pi k_F^4 \left[ -\frac{j_0(k_F r)}{k_F r} + \frac{3j_1(k_F r)}{(k_F r)^2} \right] \right)^2 \right\} \\
 &= -\frac{V}{240\pi^4} k_F^8 \int d^3r f(r) l_2(k_F r),
 \end{aligned} \tag{A.18}$$

mit der Hilfsfunktion

$$l_2(x) = 15 \left[ \frac{j_0^2(x)}{x^2} + \left( \frac{15}{x^4} - \frac{1}{x^2} \right) j_1^2(x) - \frac{8}{x^3} j_0(x) j_1(x) \right]. \tag{A.19}$$

Schließlich wird noch der Erwartungswert des doppelten Radialimpulsoperators der Form  $\mathbf{q}_r f(\mathbf{r}) \mathbf{q}_r$  mit  $\mathbf{q}_r = \vec{\mathbf{n}}_r \vec{\mathbf{q}}$ , wie er in den Radialteil der effektiven Massenkorrektur

eingeht, abgeleitet. Der direkte Term lautet mit (A.2), (A.4) und (A.5)

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{q}_r f(\mathbf{r}) \mathbf{q}_r \rangle_{\text{di}} &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | \mathbf{q}_r f(\mathbf{r}) \mathbf{q}_r | \vec{k}_1 \vec{k}_2 \rangle \\
 &= \frac{1}{2} \int d^3X d^3r f(r) \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} |\langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | \mathbf{q}_r | \vec{k}_1 \vec{k}_2 \rangle|^2 \\
 &= \frac{V^3}{2(2\pi)^6} \int d^3r f(r) \int d^3k_1 d^3k_2 \frac{1}{4} [\vec{n}_r(\vec{k}_1 - \vec{k}_2)]^2 |\langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | \vec{k}_1 \vec{k}_2 \rangle|^2 \\
 &= \frac{V}{8(2\pi)^6} \int d^3r f(r) \int d^3k_1 d^3k_2 [(\vec{n}_r \vec{k}_1)^2 + (\vec{n}_r \vec{k}_2)^2 - 2(\vec{n}_r \vec{k}_1)(\vec{n}_r \vec{k}_2)] \\
 &= \frac{V}{8(2\pi)^6} 2 \left( \frac{4\pi}{15} k_F^5 \right) \left( \frac{4\pi}{3} k_F^3 \right) \int d^3r f(r) \\
 &= \frac{V}{720\pi^4} k_F^8 \int d^3r f(r).
 \end{aligned} \tag{A.20}$$

Der Austauschterm lautet mit (A.6), (A.9) und (A.10)

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{q}_r f(\mathbf{r}) \mathbf{q}_r \rangle_{\text{xc}} &= -\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | \mathbf{q}_r f(\mathbf{r}) \mathbf{q}_r | \vec{k}_2 \vec{k}_1 \rangle \\
 &= -\frac{1}{2} \int d^3X d^3r f(r) \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | \mathbf{q}_r | \vec{x}_1 \vec{x}_2 \rangle \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | \mathbf{q}_r | \vec{k}_2 \vec{k}_1 \rangle \\
 &= -\frac{V^3}{2(2\pi)^6} \int d^3r f(r) \int d^3k_1 d^3k_2 \times \\
 &\quad \times \frac{-1}{4} [\vec{n}_r(\vec{k}_1 - \vec{k}_2)]^2 \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | \vec{x}_1 \vec{x}_2 \rangle \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | \vec{k}_2 \vec{k}_1 \rangle \\
 &= \frac{V}{8(2\pi)^6} \int d^3r f(r) \int d^3k_1 d^3k_2 \times \\
 &\quad \times [(\vec{n}_r \vec{k}_1)^2 + (\vec{n}_r \vec{k}_2)^2 - 2(\vec{n}_r \vec{k}_1)(\vec{n}_r \vec{k}_2)] \exp(-i\vec{k}_1 \vec{r}) \exp(i\vec{k}_2 \vec{r}) \\
 &= \frac{V}{8(2\pi)^6} \int d^3r f(r) \left\{ 2 \left( 4\pi k_F^3 \frac{j_1(k_F r)}{k_F r} \right) \times \right. \\
 &\quad \times \left( 4\pi k_F^5 \left[ \frac{4j_0(k_F r)}{(k_F r)^2} + \left( \frac{1}{k_F r} - \frac{12}{(k_F r)^3} \right) j_1(k_F r) \right] \right) \\
 &\quad \left. - 2 \left( 4\pi k_F^4 \left[ -\frac{j_0(k_F r)}{k_F r} + \frac{3j_1(k_F r)}{(k_F r)^2} \right] \right)^2 \right\} \\
 &= -\frac{V}{720\pi^4} k_F^8 \int d^3r f(r) l_3(k_F r),
 \end{aligned} \tag{A.21}$$

mit der Abkürzung

$$l_3(x) = 45 \left[ \frac{j_0^2(x)}{x^2} + \left( \frac{21}{x^4} - \frac{1}{x^2} \right) j_1^2(x) - \frac{10}{x^3} j_0(x) j_1(x) \right]. \tag{A.22}$$

## Anhang B

---

# Ergänzungen zu Teil II

### B.1 Pseudopotential nach Huang und Yang

An dieser Stelle soll das Konzept des Pseudopotentials nach K. Huang und C.N. Yang entsprechend den Ausführungen in [Huan63, HuYa57]<sup>1</sup> kurz dargestellt werden, um die wesentlichen Unterschiede zu der in Kapitel 7 konstruierten effektiven Kontaktwechselwirkung zu verdeutlichen.

#### B.1.1 Ableitung des Pseudopotentials

Grundgedanke des Huangschen Pseudopotentials ist es, die Wirkung der vollen Wechselwirkung auf die Relativwellenfunktion zweier Teilchen durch eine Randbedingung im Ursprung  $r = 0$  zu simulieren. Diese Randbedingung kann dann durch eine Kontaktwechselwirkung dargestellt werden.

Betrachte ein System zweier Teilchen die vermittelt eines Zentralpotentials  $v(r)$  endlicher Reichweite  $\lambda$  wechselwirken. Die Relativwellenfunktion  $\phi(\vec{r})$  ist Lösung der Schrödingergleichung

$$\frac{1}{2\mu}(\vec{\nabla}^2 + k^2)\phi(\vec{r}) = v(r)\phi(\vec{r}). \quad (\text{B.1})$$

Dank der sphärischen Symmetrie des Potentials läßt sich die Wellenfunktion in Radial- und Winkelanteil zerlegen  $\phi(\vec{r}) = R_l(r)Y_{lm}(\Omega)$ , wobei der Winkelteil  $Y_{lm}(\Omega) = Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$  durch die Kugelflächenfunktionen zu den Drehimpulsquantenzahlen  $l$  und  $m$  gegeben ist. Die Radialwellenfunktion  $R_l(r)$  gehorcht der Gleichung

$$\frac{1}{2\mu}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2\right)R_l(r) = v(r)R_l(r). \quad (\text{B.2})$$

Außerhalb der Reichweite des Potentials ist die exakte Lösung dieser Gleichung gegeben durch

$$R_l(r) = A_l [j_l(kr) - \tan \eta_l(k) n_l(kr)] \quad \text{für } r > \lambda, \quad (\text{B.3})$$

---

<sup>1</sup>Die Ableitung des Pseudopotential in [HuYa57] enthält zwei wesentliche Fehler bezüglich der Drehimpulsfaktoren in den Gleichungen (9) und (10), die sich auf das Endergebnis (12) für die höheren Partialwellen auswirken. Eine korrekte Version der Rechnung findet sich in [Huan63].

wobei  $\eta_l(k)$  die Streuphase der  $l$ . Partialwelle bezeichnet,  $j_l(x)$  bzw.  $n_l(x)$  sind die sphärischen Bessel- bzw. Neumannfunktionen zum Drehimpuls  $l$ . Der Normierungsfaktor  $A_l$  ist von den äußeren Randbedingungen abhängig und soll nicht weiter festgelegt werden.

Nun folgt der entscheidende Schritt: Es wird angenommen, daß ein Pseudopotential  $v^{\text{ps}}(r)$  existiert, das dieselben Streuphasen erzeugt wie das ursprüngliche Potential  $v(r)$ , jedoch verschwindende Reichweite aufweist. Die Radialwellenfunktion  $R_l^{\text{ps}}(r)$  zu diesem Potential erfüllt die freie Schrödingergleichung für alle  $r$  mit Ausnahme des Ursprungs

$$\mathcal{D}_l R_l^{\text{ps}}(r) = 0 \quad \text{für } r \neq 0 \quad (\text{B.4})$$

mit dem aus Gründen der Übersicht eingeführten Differentialoperator

$$\mathcal{D}_l = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2. \quad (\text{B.5})$$

Die Lösung dieser Gleichung mit Ausnahme des Punktes  $r = 0$  ist per constructionem gegeben durch

$$R_l^{\text{ps}}(r) = A_l [j_l(kr) - \tan \eta_l(k) n_l(kr)] \quad \text{für } r \neq 0, \quad (\text{B.6})$$

wobei  $\eta_l(k)$  die Streuphasen des ursprünglichen Potentials bezeichnen. Außerhalb der Reichweite des ursprünglichen Potentials, ( $r > \lambda$ ) stimmen die beiden Wellenfunktionen überein  $R_l^{\text{ps}}(r) = R_l(r)$ . Für  $0 < r < \lambda$  ist das Verhalten der vollen Lösung  $R_l(r)$  von der detaillierten Struktur des ursprünglichen Potentials abhängig und nicht nur von der asymptotischen Information die die Streuphasen enthalten. Die Lösung zum Pseudopotential  $R_l^{\text{ps}}(r)$  ist auch in diesem Bereich allein durch die Streuphasen bestimmt und entspricht einer Fortsetzung der Lösung im Außenbereich. Lediglich am Punkt  $r = 0$  ist die potentialfreie Gleichung (B.4) nicht gültig und das Pseudopotential tritt in Erscheinung.

Die Aufgabe besteht darin, den bisher unbestimmten Pseudopotentialterm, der in der Schrödingergleichung für den Punkt  $r = 0$  zu berücksichtigen ist, abzuleiten. Dazu wird die linke Seite der Radialgleichung (B.4) für die beiden Summanden der Radialwellenfunktion, die Bessel- und die Neumannfunktion, separat untersucht. Der Differentialoperator angewendet auf die Besselfunktion liefert Null für alle  $r$ , insbesondere auch für  $r = 0$

$$\mathcal{D}_l j_l(kr) = 0 \quad \text{für alle } r. \quad (\text{B.7})$$

Für die Neumannfunktion gilt dies nur für  $r \neq 0$

$$\mathcal{D}_l n_l(kr) = 0 \quad \text{für } r \neq 0, \quad (\text{B.8})$$

an der Stelle  $r = 0$  ist der Ausdruck nicht definiert. Man betrachte daher ein sphärisches Volumen mit Radius  $\epsilon$  und integriert die mit  $r^l$  gewichtete Neumannfunktion

$$\begin{aligned} \int_{V_\epsilon} d^3r r^l \mathcal{D}_l n_l(kr) &= \int_{V_\epsilon} d^3r r^l \left( \vec{\nabla}^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right) n_l(kr) \\ &= \int_{\Sigma_\epsilon} d\vec{\sigma} r^l \vec{\nabla} n_l(kr) - \int_{V_\epsilon} d^3r (l r^{l-1}) \frac{\partial}{\partial r} n_l(kr) \\ &\quad + \int_{V_\epsilon} d^3r r^l \left( - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right) n_l(kr). \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Dabei wurde das Integral über den Laplaceoperator mit Hilfe des 1. Greensche Integralsatzes in eine Oberflächenintegral über den Gradienten und ein verbleibendes Volumenintegral reduziert (partielle Integration in 3 Dimensionen). Unter der Annahme  $k\epsilon \ll 1$  lassen sich Bessel- und Neumannfunktionen entwickeln

$$j_l(x) \stackrel{x \ll 1}{\approx} \frac{x^l}{(2l+1)!!} \quad , \quad n_l(x) \stackrel{x \ll 1}{\approx} -\frac{(2l-1)!!}{x^{l+1}}, \quad (\text{B.10})$$

dabei ist  $(2l+1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2l+1)$  die sog. Doppelfaktultät. Einsetzen dieser Formen in die Integrale zeigt, daß sich das Volumenintegral aus dem 1. Greenschen Satz und der Zentrifugalterm exakt herausheben und daß das verbleibende Integral über den  $k^2$ -Term verschwindet. Es bleibt lediglich das Oberflächenintegral, das mit Hilfe der Entwicklung (B.10) explizit gelöst werden kann

$$\int_{V_\epsilon} d^3r \, r^l \mathcal{D}_l n_l(kr) \stackrel{k\epsilon \ll 1}{\approx} \int_{\Sigma_\epsilon} d\vec{\sigma} \, r^l \vec{\nabla} n_l(kr) = 4\pi \frac{(l+1)(2l-1)!!}{k^{l+1}} \quad (\text{B.11})$$

Aus dem letzten Ausdruck läßt sich ablesen, daß der Differentialoperator angewendet auf die Neumannfunktion im Integralsinne folgendermaßen umgeschrieben werden kann

$$\mathcal{D}_l n_l(kr) = 4\pi \frac{(l+1)(2l-1)!!}{k^{l+1}} \frac{\delta^{(3)}(\vec{r})}{r^l}. \quad (\text{B.12})$$

Zusammen mit Gleichung (B.7) ergibt sich für den Differentialoperator angewendet auf eine Radialwellenfunktion der Form (B.6) die für alle  $r$  gültige Gestalt

$$\mathcal{D}_l R_l^{\text{ps}}(r) = -4\pi(l+1)(2l-1)!! \frac{\tan \eta_l(k)}{k^{l+1}} \frac{\delta^{(3)}(\vec{r})}{r^l} A_l. \quad (\text{B.13})$$

Um diese Differentialgleichung als Schrödingergleichung interpretieren zu können, muß die rechte Seite um die Radialwellenfunktion ergänzt werden, dies geschieht durch Umformulierung des Normierungsfaktors  $A_l$ . Er kann mit Hilfe eines Differentialoperators aus der Radialwellenfunktion  $R^{\text{ps}}$  selbst extrahiert werden. In der Umgebung des Ursprungs nimmt die Radialwellenfunktion (B.6) mit (B.10) die Gestalt

$$R_l^{\text{ps}}(r) \stackrel{kr \ll 1}{\approx} A_l \left[ \frac{(kr)^l}{(2l+1)!!} + \tan \eta_l(k) \frac{(2l-1)!!}{(kr)^{l+1}} \right] \quad (\text{B.14})$$

an. Wie man sich leicht überzeugt, läßt sich die Normierungskonstante damit umformulieren zu (siehe hierzu auch Abschnitt B.1.2)

$$A_l = \frac{(2l+1)!!}{(2l+1)!} \frac{1}{k^l} \left[ \frac{\partial^{2l+1}}{\partial r^{2l+1}} r^{l+1} R_l^{\text{ps}}(r) \right]_{r=0}. \quad (\text{B.15})$$

Einsetzen in Gleichung (B.13) führt auf eine Gleichung, die formal die Gestalt einer Schrödingergleichung aufweist

$$\frac{1}{2\mu} \mathcal{D}_l R_l^{\text{ps}}(r) = \gamma_l \frac{\delta^{(3)}(\vec{r})}{r^l} \frac{\partial^{2l+1}}{\partial r^{2l+1}} r^{l+1} R_l^{\text{ps}}(r) \quad (\text{B.16})$$

mit der impulsabhängigen Stärke

$$\gamma_l = -\frac{4\pi}{2\mu} \frac{(l+1)(2l-1)!!(2l+1)!!}{(2l+1)!} \frac{\tan \eta_l(k)}{k^{2l+1}}. \quad (\text{B.17})$$



Diese Gleichung ist für die Pseudo-Relativwellenfunktion  $R_l^{\text{ps}}(r)$  für alle  $r$  erfüllt. Der Ausdruck auf der rechten Seite bildet das *Pseudopotential* der  $l$ . Partialwelle. Nimmt man die Interpretation der rechten Seite als zustandsunabhängiges Potential ernst, so kann die Schrödingergleichung für eine allgemeine Radialwellenfunktion  $R_l(r)$  formuliert werden

$$\frac{1}{2\mu} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right) R_l(r) = v_l^{\text{ps}}(r) R_l(r) \quad (\text{B.18})$$

mit dem Pseudopotential

$$v_l^{\text{ps}}(r) = \gamma_l \frac{\delta^{(3)}(\vec{r})}{r^l} \frac{\partial^{2l+1}}{\partial r^{2l+1}} r^{l+1}. \quad (\text{B.19})$$

Die Potentiale der einzelnen Partialwellen lassen sich mit Hilfe von Projektoren auf die einzelnen Drehimpulse zu einem Gesamtpotential zusammenfügen, darauf kann hier jedoch verzichtet werden.

### B.1.2 Diskussion des Pseudopotentials

An dieser Stelle werden einige Eigenschaften des Pseudopotentials nach Huang und Yang diskutiert, die es wesentlich von der effektiven Kontaktwechselwirkung nach Kapitel 7 unterscheiden.

Ein erster wesentlicher Punkt betrifft die Relation zum Ausgangspotential: Unter der Annahme, daß das ursprüngliche Potential *keine gebundenen Zustände* aufweist, ist das Pseudopotential (B.19) *streuphasenäquivalent* zur vollen Wechselwirkung, d.h. die Streuphasen stimmen in allen Partialwellen und zu allen Impulsen mit denen des ursprünglichen Potentials überein. Da in das Pseudopotential nur der Tangens der Streuphasen eingeht, gilt die Streuphasenäquivalenz für Potentiale mit gebundenen Zuständen nur noch Modulo dem Beitrag  $\pi n_b$  der gebundenen Zustände nach dem Levinsontheorem.

Hier liegt der große Unterschied zur effektiven Kontaktwechselwirkung: Das Konzept des Pseudopotentials orientiert sich an den Zweiteilchen-Streueigenschaften der vollen Wechselwirkung und nicht am Energiespektrum. Wie in Abschnitt 7.2.4 gezeigt, führt das zu einer dramatischen Unterschätzung der Wechselwirkungsbeiträge in einem Mean-Field-Modell bei Anwendung des Pseudopotentials jenseits der s-Welle. Dessen Eignung für Mean-Field-Rechnungen ist also mehr als fraglich.

Der zweite wesentliche Punkt ist, daß das Pseudopotential in der Form (B.19) *kein hermitescher Operator* ist. Das ist eine direkte Folge des zugrundeliegenden Konzepts, das Pseudopotential über eine Randbedingung an die Wellenfunktion zu konstruieren. Die der Ableitung zugrundegelegte Funktion  $R_l^{\text{ps}}(r)$  ist keine physikalisch sinnvolle Wellenfunktion, sie fällt lediglich außerhalb der Reichweite des ursprünglichen Potentials mit der physikalischen Wellenfunktion zusammen. Für kleine Abstände ist sie unphysikalisch, da sie für  $r \rightarrow 0$  divergiert! Im Prinzip verbietet diese Nichthermitizität die Interpretation als Potential. Für den Einsatz dieser Konstruktion in einer konventionellen Vielteilchenrechnung ist eine hermitesche Form notwendig. Es ist in der Tat möglich das Pseudopotential in eine hermitesche Form zu überführen, wie im folgenden Abschnitt gezeigt wird. Dies ist jedoch nicht unbedingt sinnvoll, da damit die Exaktheit des Pseudopotential bezüglich der Streuphasen zunichte gemacht wird.

Ein letzter Punkt ist eine gewisse Willkür des resultierenden Pseudopotentials in der Form (B.19) mit den Potentialstärken (B.17). Diese beruht auf der Darstellung der Normierungskonstanten  $A_l$  durch Ableitung der Wellenfunktion nach Gleichung (B.15). Die Verwendung der  $(2l+1)$ . Ableitung ist willkürlich, die Normkonstante kann ebenso mit einer ersten Ableitung dargestellt werden

$$A_l = \frac{(2l+1)!!}{2l+1} \frac{1}{k^l} \left[ \frac{1}{r^{2l}} \frac{\partial}{\partial r} r^{l+1} R_l^{\text{ps}}(r) \right]_{r=0}. \quad (\text{B.20})$$

Analog kann die Normierungskonstante mit beliebigen Ordnungen, begonnen mit der ersten Ableitung bis zur  $(2l+1)$ . Ableitung, dargestellt werden. Keiner der Ausdrücke ist im Rahmen des Konzepts des Pseudopotentials besonders bevorzugt, so daß das Pseudopotential (B.19) ebensogut durch beliebige andere Ableitungsordnungen formuliert werden könnte. Diese Willkür, die sich in den Beiträgen jenseits der s-Welle bemerkbar macht, wird erst wieder aufgehoben, wenn man zu einer hermiteschen Darstellung des Pseudopotentials übergeht, wie im folgenden Abschnitt gezeigt wird.

### B.1.3 Erweiterung des Pseudopotentials

Die Nichthermiteizität manifestiert sich unmittelbar bei der Berechnung von Matrixelementen des Pseudopotentials, sie sind von der Form

$$\begin{aligned} \langle \hat{R}_l | v_l^{\text{ps}} | R_l \rangle &= \gamma_l \int d^3r \frac{\hat{R}_l(r)}{r^l} \delta^{(3)}(\vec{r}) \frac{\partial^{2l+1}}{\partial r^{2l+1}} r^{l+1} R_l(r) \\ &\neq \langle R_l | v_l^{\text{ps}} | \hat{R}_l \rangle^* = \langle \hat{R}_l | v_l^{\text{ps}\dagger} | R_l \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

Das Problem konzentriert sich auf die Ableitungsoperatoren, die nur auf eine der beiden im Matrixelement auftretenden Wellenfunktionen wirken. Der Grund für die Einführung dieser Ableitungsoperatoren war die Elimination des unbekannten Normierungsfaktors der Wellenfunktion (B.15). Dieser Faktor wird von den Randbedingungen, die im Vielteilchenproblem auf die Zweiteilchenwellenfunktion wirken, bestimmt. Um dieses Problem von vornherein zu vermeiden, können derartige Randbedingungen bei der Konstruktion des Pseudopotentials berücksichtigt werden.

Für die anwendungsrelevanten Fälle läßt sich das Pseudopotential (B.19) im nachhinein auf eine hermitesche Form bringen. Im allgemeinen soll das Pseudopotential im Rahmen einer Mean-Field- oder Variationsrechnung für das Vielteilchensystem Verwendung finden. Die dabei eingesetzten Testwellenfunktionen werden meist aus Lösungen des wechselwirkungsfreien Systems abgeleitet. Hier kann angenommen werden, daß die Zweiteilchen-Relativwellenfunktion ein reguläres Verhalten zeigt und sich eine Taylorentwicklung im Ursprung in niedrigster nichtverschwindender Ordnung durchführen läßt. Es sei angenommen, daß das Verhalten der partialwellenzerlegten Wellenfunktion im Ursprung allein durch die Drehimpulsbarriere bestimmt ist

$$R_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} \frac{1}{l!} \left[ \frac{\partial^l R_l(r)}{\partial r^l} \right]_{r=0} r^l. \quad (\text{B.22})$$

Die  $(2l+1)$ -fache Ableitung bei  $r=0$  läßt sich damit direkt angeben

$$\left[ \frac{\partial^{2l+1}}{\partial r^{2l+1}} r^{l+1} R_l(r) \right]_{r=0} = \frac{(2l+1)!}{l!} \left[ \frac{\partial^l R_l(r)}{\partial r^l} \right]_{r=0}. \quad (\text{B.23})$$

An dieser Stelle wird die Willkür bezüglich der Ordnung der Ableitung bei der Definition des Pseudopotentials, wie sie im vorangehenden Abschnitt angesprochen wurde, neutralisiert. In diesem Schritt wird im wesentlichen erneut die Normierungskonstante für eine *physikalische* Wellenfunktion durch Ableitung an der Stelle  $r = 0$  bestimmt. Für das Pseudopotential ergibt sich somit der eindeutige Ausdruck

$$v_l^{\text{ps}}(\vec{r}) = \gamma_l \frac{(2l+1)!}{l!} \frac{\delta^{(3)}(\vec{r})}{r^l} \frac{\partial^l}{\partial r^l}. \quad (\text{B.24})$$

Formuliert man das Matrixelement für diese Form des Pseudopotentials, so gelangt man durch Ersetzen des Quotienten mit der konjugierten Radialwellenfunktion durch die entsprechende Ableitung nach (B.22) zu

$$\begin{aligned} \langle \hat{R}_l | v_l^{\text{ps}} | R_l \rangle &= \gamma_l \frac{(2l+1)!}{l!} \int d^3r \frac{\hat{R}_l^*(r)}{r^l} \delta^{(3)}(\vec{r}) \frac{\partial^l R_l(r)}{\partial r^l} \\ &= \gamma_l \frac{(2l+1)!}{(l!)^2} \int d^3r \frac{\partial^l \hat{R}_l^*(r)}{\partial r^l} \delta^{(3)}(\vec{r}) \frac{\partial^l R_l(r)}{\partial r^l} \stackrel{!}{=} \langle \hat{R}_l | v_l^{\text{ps}*} | R_l \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

Der letzte Term kann als Matrixelement einer *hermiteschen* Wechselwirkung aufgefaßt werden, die in Ortsdarstellung durch

$$\begin{aligned} v_l^{\text{ps}*}(\vec{r}) &= \frac{\overleftarrow{\partial}^l}{\partial r^l} \gamma_l^* \delta^{(3)}(\vec{r}) \frac{\overrightarrow{\partial}^l}{\partial r^l} \\ \text{mit } \gamma_l^* &= -\frac{4\pi}{2\mu} \frac{(l+1)(2l+1)!!(2l-1)!!}{(l!)^2} \frac{\tan \eta_l(k)}{k^{2l+1}} \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

gegeben ist. Dieses *hermitesche Pseudopotential*  $v_l^{\text{ps}*}(r)$  ist nicht mehr exakt in dem Sinne, daß die Lösungen der Schrödingergleichung zu allen Impulsen eine (Wellen)funktion mit den Streuphasen des Ausgangspotentials liefern. Es erfüllt die Schrödingergleichung (B.16) nicht mehr, da Annahmen über die Wellenfunktion im Ursprung gemacht wurden, die von der Pseudo-Radialwellenfunktion  $R_l^{\text{ps}}(r)$  nicht erfüllt werden. Vielmehr besitzt das hermitesche Pseudopotential angewendet auf physikalische Wellenfunktionen mittels der Integralkonstruktion (B.25) dieselben Matrixelemente wie das exakte nichthermitesche Pseudopotential. Daher ist es in Bezug auf Mean-Field-Rechnungen gleichwertig.

## B.2 Freies Fermigas im harmonischen Oszillator

Der einfachste Spezialfall der zu untersuchenden ultrakalten fermionischen Atome in externen Potentialen ist das nichtwechselwirkende einkomponentige Fermigas. Dieser Spezialfall wird hier verwendet, um einige allgemeine Eigenschaften der Thomas-Fermi-Näherung zu studieren. Da eine exakte quantenmechanische Lösung dieses Problems möglich ist, können durch Vergleich die Qualität und die Einschränkungen der Näherung quantitativ untersucht werden.

### B.2.1 Exakte Lösung

Das wechselwirkungsfreie Fermigas in einem äußeren harmonischen Oszillator ist eines der wenigen exakt lösbaren Systeme in der Vielteilchenquantenmechanik. Der Vielteilchengrundzustand ist durch die Slaterdeterminante der energetisch niedrigsten  $N$  Einteilchenzustände gegeben. Die Einteilchenzustände sind durch  $d$  Quantenzahlen  $\nu_{1\dots d}$  gekennzeichnet, wobei  $d$  die Dimension des Raumes bezeichnet. Hier soll von einem sphärisch symmetrischen Oszillatorpotential ( $\lambda = 1$ ) mit Oszillatorfrequenz  $\omega$  ausgegangen werden, die Verallgemeinerung auf deformierte Potentiale ist offensichtlich. Die Energie eines Einteilchenzustandes

$$\epsilon(\nu) = \omega (\nu + d/2) \quad \text{mit} \quad \nu = \sum_{i=1}^d \nu_i \quad (\text{B.27})$$

hängt nur von der Summe  $\nu$  der Quantenzahlen ab. Damit sind die Einteilchenzustände hochgradig energetisch entartet — alle Einteilchenzustände mit gleicher Summenquantenzahl  $\nu$  haben die gleiche Energie. Der Entartungsgrad für einen Einteilchenzustand mit der Summenquantenzahl  $\nu$  ist

$$\eta(\nu) = \frac{(\nu + d - 1)!}{\nu! (d - 1)!}. \quad (\text{B.28})$$

Die *magischen* Teilchenzahlen für das Fermigas im harmonischen Oszillator, d.h. die Teilchenzahlen bei denen alle Einteilchenzustände bis zu einer gegebenen Summenquantenzahl vollständig besetzt sind, ergeben sich aus folgender Relation

$$N_{\text{magic}}(\nu) = \sum_{\nu'=0}^{\nu} \eta(\nu') = \frac{(\nu + d)!}{\nu! d!}, \quad (\text{B.29})$$

dabei ist  $\nu = 0, 1, \dots$  die Summenquantenzahl des letzten (vollständig besetzten) Einteilchenzustandes. Im dreidimensionalen Fall lauten die ersten magischen Zahlen

$$N_{\text{magic}}^{d=3} = \{1, 4, 10, 20, 35, 56, 84, 120, 165, 220, \dots\}. \quad (\text{B.30})$$

Vielteilchensysteme mit einer magischen Zahl von Teilchen sind von besonderer Bedeutung, da sie als einzige nicht entartet sind und rotationssymmetrische Einteilchendichten zeigen. Ihre Energie läßt sich geschlossen als Funktion der Summenquantenzahl  $\nu$  des höchsten besetzten Einteilchenzustandes angeben

$$\begin{aligned} E_{\text{magic}}(\nu) &= \sum_{\nu'=0}^{\nu} \epsilon(\nu') \eta(\nu') \\ &= \omega \left[ \frac{(\nu + d)!}{\nu! d!} + \frac{(\nu + d)!}{(\nu - 1)! d!} + \frac{(\nu + d)!}{2 \nu! (d - 1)!} - \frac{(\nu + d + 1)!}{\nu! (d + 1)!} \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.31})$$

Ein allgemeiner Ausdruck für die Energie des  $N$ -Teilchenfermigases im harmonischen Oszillator läßt sich formal ebenso angeben. Dazu wird zunächst die Summenquantenzahl des letzten besetzten Einteilchenzustandes im Vielteilchensystem als Funktion der Teilchenzahl  $N$  ausgedrückt

$$\nu_{\text{last}}(N) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \theta(N - N_{\text{magic}}(\nu) - 1) \quad (\text{B.32})$$

mit der üblichen Definition der Sprungfunktion  $\theta(x)$ , die für  $x \geq 0$  den Wert 1 annimmt und sonst verschwindet. Die Energie des  $N$ -Teilchensystems ergibt sich sofort durch sukzessives Füllen der Einteilchenniveaus, wobei die Energien des jeweils „letzten Teilchens“ summiert werden

$$\begin{aligned} E(N) &= \sum_{n=1}^N \epsilon(\nu_{\text{last}}(n)) \\ &= \omega \left[ \sum_{n=1}^N \sum_{\nu=0}^{\infty} \Theta(n - N_{\text{magic}}(\nu) - 1) + \frac{d}{2} N \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.33})$$

Dieser Ausdruck kann leicht numerisch ausgewertet werden. Die Summation über die Summenquantenzahl  $\nu$  kann oberhalb eines gewissen Schranke abgebrochen werden, eine in jedem Fall gültige obere Abschätzung für diese Schranke ist durch die Teilchenzahl  $N$  gegeben.

### B.2.2 Thomas-Fermi-Näherung

Die Behandlung des Fermigases in einem äußeren harmonischen Oszillator  $U(\vec{x})$  in Thomas-Fermi-Näherung basiert auf der Energiedichte (8.32). Für den wechselwirkungsfreien Fall reduziert sie sich auf die Beiträge der kinetischen Energie und des externen Potentials

$$\mathcal{E}[\kappa](\vec{x}) = \frac{1}{6\pi^2} U(\vec{x}) \kappa^3(\vec{x}) + \frac{1}{20\pi^2 m} \kappa^5(\vec{x}). \quad (\text{B.34})$$

Für ein mehrkomponentiges System entkoppeln die Energiedichten der einzelnen Spezies und es genügt eine einzelne Komponente zu untersuchen. Die Extremalbedingung (8.39) nimmt ohne die Wechselwirkungsterme die einfache Form

$$m [\mu - U(\vec{x})] = \frac{1}{2} \kappa^2(\vec{x}) \quad (\text{B.35})$$

an. Für einen sphärisch symmetrischen harmonischen Oszillator  $U(x) = \frac{1}{2m\ell^4} x^2$  mit Oszillatorlänge  $\ell = 1/\sqrt{m\omega}$  erhält man daraus unmittelbar folgende analytische Gestalt für den lokalen Fermiimpuls des Grundzustandes:

$$\kappa(\vec{x}) = \sqrt{2m [\mu - U(\vec{x})]} = \frac{1}{\ell} \sqrt{2m\ell^2 \mu - \left(\frac{x}{\ell}\right)^2}. \quad (\text{B.36})$$

Die Grundzustandsdichte ergibt sich mittels der Beziehung  $\rho(\vec{x}) = \frac{1}{6\pi^2} \kappa^3(\vec{x})$ . Eine charakteristische Eigenschaft der Thomas-Fermi-Lösung ist das Verschwinden der Dichte auf einer Hyperfläche, die durch Gleichheit des chemischen Potentials  $\mu$  und des Fallenpotentials definiert ist. Für den sphärischen harmonischen Oszillator führt das auf den klassischen Umkehrradius

$$x_{\text{cl}} = \sqrt{2m\ell^4 \mu}. \quad (\text{B.37})$$

Jenseits des klassischen Umkehrpunkts ist die Dichte identisch Null zu setzen, die Gleichung (B.36) hat dort keine physikalische Bedeutung. Das chemische Potential selbst

ergibt sich aus der Nebenbedingung, daß das Integral über die Dichte die Gesamtteilchenzahl ergibt

$$N = 4\pi \int_0^{x_{\text{cl}}} dx \, x^2 \rho(x) = \frac{1}{6} (m\ell^2 \mu)^3 = \frac{1}{6} \left(\frac{\mu}{\omega}\right)^3. \quad (\text{B.38})$$

Daraus läßt sich folgende Beziehung zwischen dem chemischen Potential und der Teilchenzahl ablesen

$$\mu = \frac{1}{m\ell^2} \sqrt[3]{6N} = \omega \sqrt[3]{6N}. \quad (\text{B.39})$$

Dieser Ausdruck läßt sich wiederum in (B.36) und (B.37) einsetzen, um das chemische Potential zu eliminieren. Für den lokalen Fermiimpuls folgt so

$$\kappa(x) = \frac{1}{\ell} \sqrt{2\sqrt[3]{6N} - \left(\frac{x}{\ell}\right)^2} = \frac{2\sqrt[3]{6N}}{x_{\text{cl}}} \sqrt{1 - \left(\frac{x}{x_{\text{cl}}}\right)^2} \quad (\text{B.40})$$

und für den klassischen Umkehrpunkt

$$x_{\text{cl}} = \ell \sqrt{2} \sqrt[6]{6N}. \quad (\text{B.41})$$

Schließlich läßt sich damit auch die Grundzustandsenergie des Fermigases in Thomas-Fermi-Näherung bestimmen. Durch Einsetzen des lokalen Fermiimpulses (B.36) und des chemischen Potentials (B.39) in die Energiedichte (B.34) und Integration bis zum klassischen Umkehrpunkt ergibt sich für die Energie pro Teilchen

$$\frac{E}{N} = \frac{4\pi}{N} \int_0^{x_{\text{cl}}} dx \, x^2 \mathcal{E}[\kappa](x) = \frac{3}{4} \frac{1}{m\ell^2} \sqrt[3]{6N} = \frac{3}{4} \mu. \quad (\text{B.42})$$

Die Energie pro Teilchen in Thomas-Fermi-Näherung ist eine glatte Funktion proportional zu  $\sqrt[3]{N}$ . In Konsequenz des semiklassischen Charakters können spezielle Quanteneffekte, wie z.B. die magischen Teilchenzahlen, nicht beschrieben werden. Dennoch liefert das einfache Thomas-Fermi-Modell schon eine durchaus zufriedenstellende Beschreibung des globalen Verhaltens, wie im folgenden Abschnitt gezeigt wird.

### B.2.3 Qualität der Thomas-Fermi-Näherung

Anhand des wechselwirkungsfreien Systems läßt sich die Qualität der Thomas-Fermi-Näherung durch direkten Vergleich mit den exakten Ergebnissen, z.B. für die Energie des Fermigases, prüfen. Hier geht es insbesondere um die Anwendbarkeit des semiklassischen Ansatzes sowie die Relevanz der Gradientenkorrektur zur Thomas-Fermi-Näherung.

Sei zunächst die Energie des nichtwechselwirkenden Fermigases für kleine Teilchenzahlen betrachtet. In Abbildung B.1(a) ist die exakte Energie pro Teilchen der Energie in Thomas-Fermi-Näherung für Fermigase mit bis zu 100 Teilchen gegenübergestellt. Es wird deutlich, daß die Thomas-Fermi-Näherung die glatte Komponente der Energieabhängigkeit, entsprechend der Aufteilung des Strutinskytheorems (vgl. Abschnitt 8.1.2), für alle Teilchenzahlen ausgezeichnet beschreibt. Darüber hinaus machen die Quantenkorrekturen zu dieser semiklassischen Energieabhängigkeit nur wenige Prozent aus.

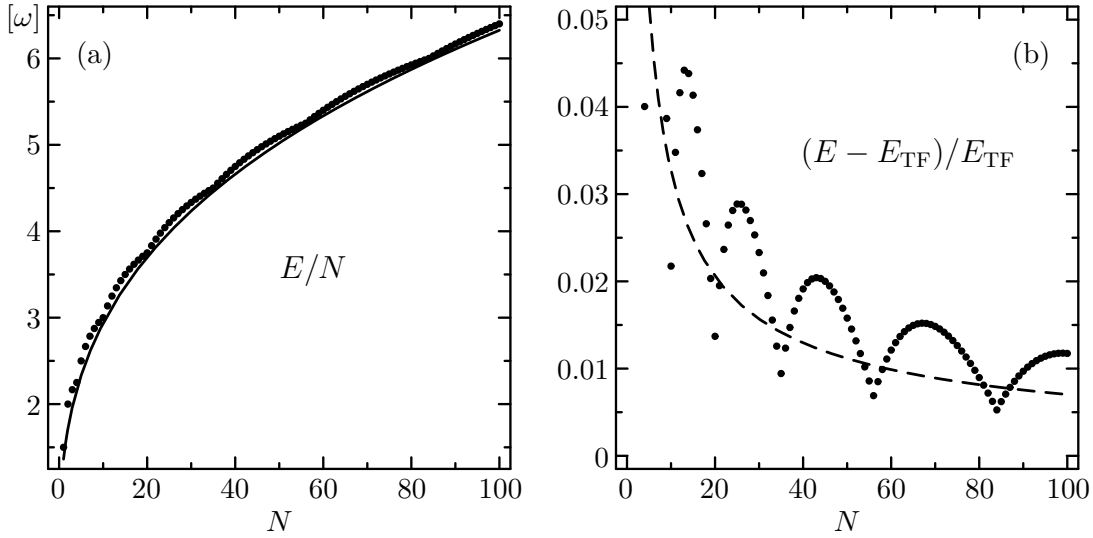


Abbildung B.1 · (a) Vergleich der exakten Energie pro Teilchen (•) für ein Fermigas im sphärischen harmonischen Oszillator mit dem Resultat der Thomas-Fermi-Näherung (—). (b) Relative Differenz zwischen exakter Energie und Thomas-Fermi-Näherung (•) im Vergleich zum störungstheoretisch berechneten Beitrag der Gradientenkorrektur (---).

Eine quantitative Aussage erlaubt Abbildung B.1(b), worin die relative Differenz zwischen exakter Energie und semiklassischer Thomas-Fermi-Energie dargestellt ist. Hier zeigen sich deutlich die sog. „Schaleneffekte“: Systeme mit magischen Teilchenzahlen haben bezogen auf den glatten Anteil der Energieabhängigkeit eine besonders niedrige Energie. Diese Fluktuationen sind durch genuine Quanteneffekte, nämlich die vollständige Besetzung einer Gruppe energetisch entarteter Einteilchenniveaus, hervorgerufen und gehen klar über die semiklassische Näherung hinaus. Sie bilden die fluktuierende Komponente des Strutinskytheorems, die offenbar wesentlich kleiner als der glatte semiklassische Beitrag ist. Für ein System mit 100 Teilchen, erzeugen die Schaleneffekte nur eine etwa einprozentige Variation der Energie, bei 1000 Teilchen beträgt die Variation lediglich 0.2%. Für die im folgenden Kapitel zur Diskussion stehenden Teilchenzahlen in der Größenordnung  $10^6$  sind die Quantenfluktuationen vernachlässigbar und der semiklassische Zugang stellt eine ausgezeichnete Näherung dar.

Die Abbildung B.1(b) zeigt eine weitere systematische Abweichung der Energien in Thomas-Fermi-Näherung von den exakten Resultaten. Neben den Fluktuationen weisen die exakten Energien eine mit der Teilchenzahl fallende Verschiebung gegenüber der Thomas-Fermi-Näherung auf, die auf die Vernachlässigung der Gradiententerme zurückzuführen ist. Diese Abweichung kann durch Berücksichtigung der Gradientenkorrektur zur kinetischen Energie (8.45) im Sinne einer Störungsrechnung ausgeglichen werden. Dazu wird das Integral über die Energiedichte der Gradientenkorrektur  $\mathcal{T}_\nabla$  mit dem lokalen Fermiimpuls in Thomas-Fermi-Näherung (B.40) berechnet

$$\frac{T_\nabla}{N} = \frac{4\pi}{N} \int dx x^2 \mathcal{T}_\nabla[\kappa](x) = \frac{3}{8m\ell^2} \frac{1}{\sqrt[3]{6N}}. \quad (\text{B.43})$$

Demnach fällt die Energie der Gradientenkorrektur  $T_\nabla/N$  mit wachsender Teilchenzahl proportional zu  $N^{-1/3}$  ab, während die Thomas-Fermi-Energie proportional zu  $N^{1/3}$  wächst. In Abbildung B.1(b) ist der relative Beitrag der Gradientenkorrektur als gestrichelte Kurve dargestellt. Es zeigt sich, daß die Thomas-Fermi-Näherung zuzüglich

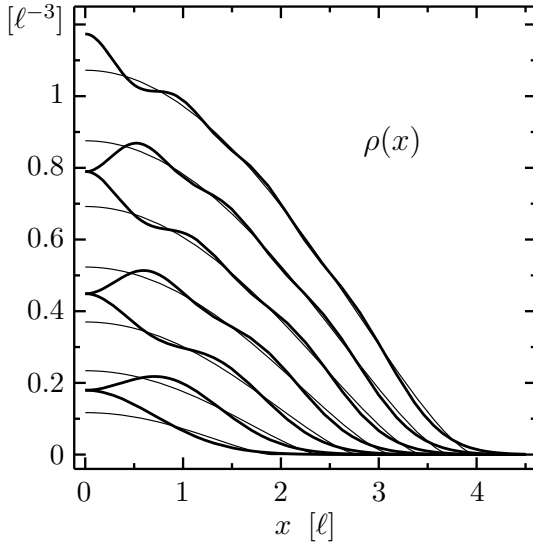


Abbildung B.2 · Vergleich der Einteilchendichten berechnet im Rahmen der Fermionischen Molekulardynamik (—) und in Thomas-Fermi-Näherung (---) für die magischen Teilchenzahlen  $N = 1, 4, 10, 20, 35, 56$  und  $84$  (von unten nach oben).

Gradientenkorrektur den glatten Teil der Energieabhängigkeit sehr gut beschreibt, die Quanteneffekte äußern sich lediglich als Fluktuationen um dieses semiklassische Mittel.

Der Beitrag der Gradientenkorrektur, wie auch die Spannweite der Fluktuationen, liegen für ein Fermigas mit 100 Teilchen bei etwa 1%. Bei den im folgenden Kapitel untersuchten Teilchenzahlen  $N \approx 10^6$  liegen beide Beiträge in der Größenordnung von 0.002% und sind somit absolut vernachlässigbar. Das belegt, daß sowohl der semiklassische Ansatz als auch die Lokale-Dichte- oder Thomas-Fermi-Näherung für die Beschreibung der ultrakalten verdünnten Fermigase in externen Potentialen hervorragend geeignet sind.

Abschließend soll die Qualität der Thomas-Fermi-Näherung anhand der Dichteprofile für Systeme niedriger Teilchenzahl illustriert werden. Dazu wird die Thomas-Fermi-Dichte (B.40) mit dem Resultat eines quasi-exakten Modells, der *Fermionischen Molekulardynamik* (FMD), verglichen. Die Details dieses Modells gehen über den Rahmen dieser Arbeit hinaus, sind jedoch an anderer Stelle ausführlich dokumentiert [FMD00, FMD97a, Neff98, Schn96]. Das Modell basiert auf der Beschreibung des fermionischen Vielteilchenzustandes durch eine Slaterdeterminante aus parametrisierten Einteilchenzuständen. Jeder Einteilchenzustand ist durch eine Gaußfunktion mit variablem Schwerpunktsort und -impuls sowie variabler Breite dargestellt. Der Grundzustand wird durch numerische Minimierung der Energie des Vielteilchensystems bestimmt. Im Rahmen dieses Modells, das für die Beschreibung der Struktur von Atomkernen bzw. der Dynamik von Schwerionenkollisionen entwickelt wurde, lassen bei gegenwärtiger Rechnerleistung Systeme mit bis zu 150 Teilchen behandelt. Im Falle des wechselwirkungsfreien Fermigases im harmonischen Oszillator ist das Modell praktisch exakt, da die Parametrisierung der Einteilchenzustände im Zusammenwirken mit der Antisymmetrisierung des Vielteilchenzustandes, den exakten Eigenzustand des Vielteilchensystems im harmonischen Oszillator mit hoher Genauigkeit reproduzieren kann [Schn96]. Dementsprechend stimmen die Energien bis auf die numerischen Toleranzen der Minimierungsroutine mit den exakten Werten überein.

Die im Rahmen der FMD berechneten Einteilchendichten des freien Fermigases im harmonischen Oszillator werden in Abbildung B.2 den Thomas-Fermi-Dichten für die niedrigsten magischen Teilchenzahlen gegenübergestellt. Die quantenmechanisch praktisch exakten Dichten der FMD zeigen im Zentrum der Falle typische Oszillationen, die



noch auf die Struktur der Einteilchenzustände hindeuten. Dagegen fallen die Thomas-Fermi-Dichten monoton mit dem Abstand ab, was auf die semiklassische Näherung zurückzuführen ist. Trotzdem beschreibt die Thomas-Fermi-Näherung die allgemeine Form der Dichteprofile, selbst für derart geringe Teilchenzahlen, recht gut. Lediglich die genuin quantenmechanischen Fluktuationen der Dichte können nicht reproduziert werden. Im Verhältnis zum Absolutwert der Dichte verlieren diese Fluktuationen mit wachsender Teilchenzahl an Bedeutung, so daß die Thomas-Fermi-Näherung bereits bei ca. 1000 Teilchen eine sehr gute Approximation für das Dichteprofil liefert. Das gilt natürlich erst recht für Systeme mit  $10^6$  und mehr Teilchen.

## MATHEMATICA-Notebooks

Der überwiegende Teil der numerischen Rechnungen dieser Arbeit wurde mit dem Computeralgebrasystem MATHEMATICA durchgeführt. Die dazu entwickelten Notebooks geben einen guten Einblick in die Funktionsweise der verwendeten theoretischen Methoden und in die physikalischen Zusammenhänge.

Um dem interessierten Leser die Möglichkeit zu geben, diese Zusammenhänge nachzuvollziehen, wurden einige exemplarische MATHEMATICA-Notebooks erarbeitet, die einzelne Aspekte der im Hauptteil dieser Arbeit diskutierten Themen beleuchten. Die Quelltexte dieser Notebooks für die MATHEMATICA-Versionen 3 und 4 sind im Internet unter

<http://theory.gsi.de/~rroth/phd/>

verfügbar. Die Notebooks sind klar strukturiert und kommentiert, allerdings wird der physikalische und formale Hintergrund erst im Zusammenhang mit den Ausführungen in dieser Arbeit verständlich. Im folgenden werden die einzelnen Dateien mit einer kurzen Beschreibung des Inhalts und der Ergebnisse aufgeführt.

### *C.1 Neutronenmaterie mit Homework-1-Potential*

Als erste Demonstration der Anwendung der Methode der unitären Korrelatoren wird das Problem der homogene Neutronenmaterie mit Homework-1-Potential aufgegriffen, wie es in Kapitel 3 diskutiert wird. Die folgenden Notebooks widmen sich der Bestimmung optimaler Korrelatoren für dieses Problem, der Berechnung der Energie als Funktion der Dichte, der Einführung dichteabhängiger Korrelatoren und der Bestimmung korrelierter Ein- und Zweiteilchendichten.

**hw1\_energy\_2opt.nb** — In diesem Beispiel wird der optimale Korrelator für das Homework-1-Problem durch Minimierung des korrelierten Energieerwartungswertes im Zweiteilchensystem bestimmt (siehe Abschnitt 3.1.1). Die Korrelationsfunktion wird mittels einer einfachen Parametrisierung mit drei Variationsparametern dargestellt, die Ansatzwellenfunktion ist eine Konstante. Da das Potential rein abstoßend ist, führt die uneingeschränkte Energieminimierung auf einen Korrelator unendlicher Reichweite. Man ist gezwungen die Reichweite des Korrelators vorzugeben und nur die verbleibenden Parameter durch Variation zu bestimmen. Mit

dem so definierten zweiteilchenoptimalen Korrelator wird die korrelierte Energie für Neutronenmaterie als Funktion der Dichte bestimmt (vgl. Abschnitt 3.1.2). Das Ergebnis stimmt recht gut mit sehr aufwendigen FHNC- und VMC-Rechnungen überein. Bei spezieller Wahl des Reichweiteparameters des zweiteilchenoptimalen Korrelators lassen sich die Referenzrechnungen mit großer Genauigkeit reproduzieren.

**hw1\_energy\_mopt.nb** — Eine andere Methode die Korrelationsfunktion festzulegen besteht in der Minimierung des korrelierten Energieerwartungswertes in homogener Materie (siehe Abschnitt 3.1.4). Hierbei existiert ein eindeutiges Energieminimum als Funktion der Parameter des Ansatzes für die Korrelationsfunktion bei gegebener Dichte. Der resultierende Korrelator hängt nur schwach von der Dichte ab, so daß von einem mittleren zustandsunabhängigen Korrelator ausgegangen werden kann. Die mit diesem materieoptimalen Korrelator berechnete Energie in Zweiteilchennäherung liegt für große Dichten signifikant unter der Referenz. Wie nach dem Ritzschen Variationsprinzip zu erwarten, liegen die Energien auch unterhalb derer des zweiteilchenoptimalen Korrelators. Die Minimierung senkt die Energien in Zweiteilchennäherung künstlich auf Kosten der höheren Ordnungen der Clusterentwicklung ab. Es wird nötig die Beiträge jenseits der Zweiteilchenordnung zu berücksichtigen, wenigstens in effektiver Weise.

**hw1\_energy\_dens.nb** — Eine Möglichkeit, die Beiträge jenseits der Zweiteilchenordnung effektiv zu berücksichtigen, ist die Konstruktion dichteabhängiger Korrelatoren (vgl. Abschnitt 3.2.2). Ausgehend von dem materieoptimalen Korrelator, wie im vorangehenden Notebook bestimmt, werden die Korrelatorparameter mit der Dimension einer Länge mit einer linear mit dem Fermiimpuls abfallenden Funktion skaliert. Der Steigungsparameter wird durch Anpassung des in Zweiteilchennäherung bestimmten Energieerwartungswertes in Materie an das Resultat einer VMC-Rechnung bei einem gegebenen Wert der Dichte bestimmt. Die mit diesem dichteabhängigen Korrelator berechnete Energie in Zweiteilchennäherung stimmt im gesamten Dichteintervall ausgezeichnet mit den Referenzenergien überein. Die dichteabhängigen Korrelatoren stellen ein mächtiges Werkzeug dar, um ohne numerischen Mehraufwand die Effekte jenseits der Zweiteilchennäherung zu berücksichtigen. Durch Anpassung eines einzigen phänomenologischen Parameters läßt sich die Zustandsgleichung in einem weiten Dichteintervall reproduzieren. Mit der einmal fixierten Dichteabhängigkeit können andere Observablen, z.B. korrelierte Dichten, berechnet werden.

**hw1\_density\_dens.nb** — Der materieoptimale und der dichteabhängige Korrelator werden verwendet, um den Einfluß der Korrelationen auf Ein- und Zweiteilchendichten zu studieren. Zuerst werden die Diagonalelemente der korrelierten Zweiteilchendichte für beide Korrelatoren bestimmt (siehe Abschnitt 3.3.1). Die korrelierte Zweiteilchendichte zeigt ein dominantes Korrelationsloch, in dem die Dichte praktisch auf Null reduziert ist, während die unkorrelierte Dichte nur das Austauschloch, in dem die Dichte wegen der zweifachen Spinentartung auf die Hälfte abgesenkt ist, aufweist. Das Korrelationsloch des dichteabhängigen Korrelators besitzt entsprechend der Skalierung der Korrelatorparameter einen kleineren Radius. Die korrelierten Außerdiagonalelemente der Einteilchendichte in Ortsdarstellung (vgl. Abschnitt 3.3.2) zeigen eine leichte Modifikation der Amplitude. Die Fou-

riertransformation führt auf die Besetzungszahlen im Impulsraum. Hier zeigt sich der Effekt der kurzreichweitigen wechselwirkungsinduzierten Korrelationen in der Bevölkung von Zuständen oberhalb des Fermiimpulses und entsprechend einer Entvölkung von Zuständen innerhalb der Fermikugel. Der Anteil der außerhalb der Fermikugel bevölkerten Zustände wächst mit steigender Dichte. Oberhalb einer gewissen Dichte liefert der materieoptimale Korrelator negative Besetzungszahlen. Das ist klarer Weise eine Pathologie der Zweiteilchennäherung. Die effektive Berücksichtigung höherer Ordnungen mittels des dichteabhängigen Korrelators verhindert solche unphysikalischen Ergebnisse. Diese Rechnungen demonstrieren die Universalität der Methode der unitären Korrelatoren. Sie erlaubt die Beschreibung des Einflusses des Cores der Wechselwirkung auf alle physikalischen Observablen in konsistenter Weise. Darüber hinaus stellt die Zweiteilchennäherung plus Dichteabhängigkeit ein wertvolles Werkzeug dar, um mit moderatem numerischen Aufwand bis zu hohen Dichten eine gute effektive Beschreibung der Korrelationseffekte im Vielteilchensystem zu liefern.

## C.2 $^4\text{He}$ -Flüssigkeit und Tröpfchen

Diese drei Notebooks demonstrieren die Anwendung der Methode der unitären Korrelatoren auf bosonische Systeme am Beispiel des atomaren  $^4\text{He}$  mit Lennard-Jones-Wechselwirkung. Es werden sowohl homogene unendliche  $^4\text{He}$ -Flüssigkeiten (Kapitel 5) als auch Tröpfchen kleiner Teilchenzahl (Kapitel 6) behandelt. Besonderes Augenmerk richtet sich auf die Anwendung dichteabhängiger Korrelatoren in Zweiteilchennäherung.

**he4\_liquid\_2body.nb** — Zunächst wird der optimale Korrelator durch Wahl einer geeigneten Parametrisierung der Korrelationsfunktion und Minimierung des Energieerwartungswertes in homogener  $^4\text{He}$ -Flüssigkeit bestimmt (siehe Abschnitt 5.3.1). Mit der optimalen Korrelationsfunktion werden die Beiträge zum korrelierten Hamiltonoperator dargestellt und mit dem unkorrelierten Lennard-Jones-Potential verglichen. Abschließend wird der korrelierte Energieerwartungswert als Funktion der Dichte bestimmt (siehe Abschnitt 5.3.3). Wie sich zeigt, ist die Zweiteilchennäherung für bosonische Materie nicht in der Lage, ein Energieminimum bei endlichen Dichten zu beschreiben. Die Energie sinkt proportional der Dichte ab. Dennoch demonstriert diese Anwendung, daß der unitäre Korrelator in der Lage ist, den extrem starken Core des Lennard-Jones-Potentials vollkommen zu neutralisieren.

**he4\_liquid\_2dens.nb** — Der im vorangehenden Notebook bestimmte optimale Korrelator wird um eine phänomenologische Dichteabhängigkeit erweitert (siehe Abschnitt 5.3.4), um den Einfluß der höheren Ordnungen der Clusterentwicklung in effektiver Weise auf Zweiteilchenniveau zu beschreiben. Der eine Parameter der Dichteabhängigkeit wird so gewählt, daß die Energie einer GFMC-Rechnung für eine bestimmte Dichte (Sättigungsdichte) reproduziert wird. Mit dem so definierten dichteabhängigen Korrelator wird die Energie der  $^4\text{He}$ -Flüssigkeit in Zweiteilchennäherung als Funktion der Dichte bestimmt. Das Resultat reproduziert die als exakt anzusehenden GFMC-Rechnung in einem weiten Bereich um den Sättigungspunkt mit großer Genauigkeit. Mit lediglich einem freien Parameter gelingt es, den Verlauf der Zustandsgleichung sehr gut zu beschreiben. Das demonstriert wie mächtig die Methode der unitären Korrelatoren selbst bei derart stark korre-

lationsdominierten Systemen ist.

**he4\_droplet\_2dens.nb** — Mit dem optimalen statischen und dem dichteabhängigen Korrelator, wie sie in den vorangehenden Notebooks bestimmt wurden, werden die Bindungsenergien und rms-Radien kleiner <sup>4</sup>He-Tröpfchen untersucht. Als Vielteilchen-Versuchszustand wird ein Produkt aus gaußförmigen Einteilchenzuständen mit variabler Breite gewählt. Der Parameter wird durch Minimierung der korrelierten Energie in Zweiteilchennäherung unter Verwendung des statischen (siehe Abschnitt 6.2.1) bzw. des dichteabhängigen Korrelators (siehe Abschnitt 6.2.3) bestimmt. So werden die Grundzustandswellenfunktionen von <sup>4</sup>He-Tröpfchen mit bis zu 10 Teilchen bestimmt und deren Energien und Radien berechnet. Die Ergebnisse werden mit aufwendigen Variations-Monte-Carlo-Rechnungen verglichen, es zeigt sich, daß der statische Korrelator in Zweiteilchennäherung zur Überbindung führt. Der dichteabhängige Korrelator reproduziert die Referenzenergien aber hervorragend. Das belegt, daß das Konzept der Dichteabhängigkeit universellen Charakter hat. Die in der homogenen Flüssigkeit angepaßte Dichteabhängigkeit führt ohne Änderung auch zu einer hervorragenden Beschreibung der Energien in Systemen kleiner Teilchenzahl.

## Notation

- *Konstanten*

$\hbar = 1$	Plancksches Wirkungsquantum
$\hbar^2/m_N = 41.4711 \text{ MeV fm}^2$	inverse mittlere Nukleonenmasse

- *Koordinaten und Impulse*

$\vec{x}$	Ortskoordinate eines Teilchens
$\vec{p}$	Impuls eines Teilchens
$\vec{r} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2$	Relativkoordinate zweier Teilchen
$\vec{q} = \frac{1}{2}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)$	Relativimpuls zweier Teilchen
$\vec{X} = \frac{1}{N} \sum_i^N \vec{x}_i$	Schwerpunktskoordinate eines $N$ -Teilchensystems
$\vec{P} = \sum_i^N \vec{p}_i$	Schwerpunktsimpuls eines $N$ -Teilchensystems
$x =  \vec{x} , p =  \vec{p} , \dots$	Beträge der Koordinaten- und Impulsvektoren

- *Operatoren*

$\mathbf{o}$	$k$ -Teilchenoperator im $k$ -Teilchenraum
$\mathbf{o}(i_1 \dots i_k)$	$k$ -Teilchenoperator im Vielteilchenraum bezüglich der Einteilchenräume $i_1, \dots, i_k$
$\mathbf{O}$	allgemeiner Operator im Vielteilchenraum
$\mathbf{O}_N$	allgemeiner Operator im $N$ -Teilchenraum
$\mathbf{O}^{[k]}$	irreduzibler $k$ -Teilchenanteil eines Operators im Vielteilchenraum

- *Methode der unitären Korrelatoren*

$\mathbf{C}$	Korrelationsoperator im Vielteilchenraum
$\mathbf{c} = \mathbf{C}_2$	Korrelationsoperator im Zweiteilchenraum
$\tilde{\mathbf{O}} = \mathbf{C}^\dagger \mathbf{O} \mathbf{C}$	korrelierter Operator im Vielteilchenraum
$\tilde{\mathbf{O}}^{[k]}$	irreduzibler $k$ -Teilchenanteil eines korrelierten Operators
$\tilde{\mathbf{O}}^{C2}$ bzw. $\tilde{\mathbf{O}}^{C3}$	korrelierter Operator in Zwei- bzw. Dreiteilchennäherung
$ \tilde{\psi}\rangle = \mathbf{C}  \psi\rangle$	korrelierter Zustand

## Literaturverzeichnis

- [AbMc97] E. R. I. Abraham, W. I. MacAlexander, J. M. Gerton, R. G. Hulet, et al.; *Triplet s-Wave Resonance in  $^6\text{Li}$  Collisions and Scattering Length for  $^6\text{Li}$  and  $^7\text{Li}$* ; Phys. Rev. A 55 (1997) R3299.
- [AnEn95] M.H. Anderson, J.R. Ensher, M.R. Matthews, C.E. Wieman, et al.; *Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor*; Science 269 (1995) 198.
- [AzNa79] R.A. Aziz, V.P.S. Nain, J.S. Carley, W.L. Taylor, et al.; *An Accurate Intermolecular Potential for Helium*; J. Chem. Phys. 70 (1979) 4330.
- [BeBr00] P. F. Bedaque, E. Braaten, H.-W. Hammer; *Three-Body Recombination in Bose Gases with Large Scattering Length*; Phys. Rev. Lett. 85 (2000) 908.
- [BeCi76] O. Benhar, C. Ciofi degli Atti, S. Fantoni, S. Rosati, et al.; *Lowest-Order and Hypernetted-Chain Calculations of Nuclear Matter*; Phys. Lett. 64B (1976) 395.
- [BeKe81] Chia-Wei Woo; *Microscopic Calculations of Condensed Phases of Helium*; in K. H. Bennemann, J. B. Ketterson, editors, *The Physics of Liquid and Solid Helium*; volume I; Wiley Interscience (1981) 349.
- [BlWe79] J.M. Blatt, V.F. Weisskopf; *Theoretical Nuclear Physics*; Springer-Verlag, New York (1979).
- [Bohn00] J.L. Bohn; *Cooper Pairing in Ultracold  $^{40}\text{K}$  using Feshbach Resonances*; Phys. Rev. A 61 (2000) 053409.
- [BrGa58] K.A. Brueckner, J.L. Gammel; *Properties of Nuclear Matter*; Phys. Rev. 109 (1958) 1023.
- [BrGu85] M. Brack, C. Guet, H.-B. Hakansson; *Selfconsistent Semicalssical Description of Average Nuclear Properties — A Link Between Microscopic and Macroscopic Models*; Phys. Rep. 123 (1985) 275.
- [BrSm89] I.N. Bronstein, K.A. Semendjajew; *Taschenbuch der Mathematik*; B.G. Teubner Verlagsgesellschaft, Stuttgart, Leipzig (1991).
- [CeCh77] D. Ceperley, G.V. Chester, M.H. Kalos; *Monte Carlo Simulation of a Many-Fermion Study*; Phys. Rev. D 16 (1977) 3081.
- [Clar79] J.W. Clark; *Variational Theory of Nuclear Matter*; Prog. Part. Nucl. Phys. 2 (1979) 89.

- [CoCl00] S.L. Cornish, N.R. Claussen, J.L. Roberts, E.A. Cornell, et al.; *Stable  $^{85}\text{Rb}$  Bose-Einstein Condensates with Widely Tunable Interactions*; Phys. Rev. Lett. 85 (2000) 1795.
- [CoEn99] E.A. Cornell, J.R. Ensher, C.E. Wieman; *Experiments in Dilute Atomic Bose-Einstein Condensation*; in *Proceedings of the Enrico Fermi summer school on Bose-Einstein condensation in Varenna, Italy*. (1998) e-print: cond-mat/9903109.
- [CoFr98] Ph. Courteille, R. S. Freeland, D. J. Heinzen, F. A. van Abeelen, et al.; *Observation of a Feshbach Resonance in Cold Atom Scattering*; Phys. Rev. Lett. 81 (1998) 69.
- [DaGi99] F. Dalfovo, St. Giorgini, L.P. Pitaevskii, S. Stringari; *Theory of Bose-Einstein Condensation in Trapped Gases*; Rev. Mod. Phys. 71 (1999) 463.
- [Day67] B.D. Day; *Elements of the Brueckner-Goldstone Theory of Nuclear Matter*; Rev. Mod. Phys. 39 (1967) 719.
- [Day78] B.D. Day; *Current State of Nuclear Matter Calculations*; Rev. Mod. Phys. 50 (1978) 495.
- [DeBo99] B. DeMarco, J. L. Bohn, J. P. Burke, Jr. M. Holland, et al.; *Measurement of p-Wave Threshold Law Using Evaporatively Cooled Fermionic Atoms*; Phys. Rev. Lett. 82 (1999) 4208.
- [DeJi99] B. DeMarco, D. S. Jin; *Onset of Fermi Degeneracy in a Trapped Atomic Gas*; Science 285 (1999) 1703.
- [FMD00] H. Feldmeier, J. Schnack; *Molecular Dynamics for Fermions*; Rev. Mod. Phys. 72 (2000) .
- [FMD95] H. Feldmeier, K. Bieler, J. Schnack; *Fermionic Molecular Dynamics for Ground States and Collisions of Nuclei*; Nucl. Phys. A586 (1995) 493.
- [FMD97a] H. Feldmeier, J. Schnack; *Fermionic Molecular Dynamics*; Prog. Part. Nucl. Phys. 39 (1997) 393.
- [GaCh57] J.L. Gammel, R.S. Christian, R.M. Thaler; *Calculation of Phenomenological Nucleon-Nucleon Potentials*; Phys. Rev. 105 (1957) 311.
- [GeId99] W. Geist, A. Idrizbegovic, M. Marinescu, T. A. B. Kennedy, et al.; *Evaporative Cooling of Trapped Fermionic Atoms*; Phys. Rev. A 61 (1999) 13406.
- [Gott66] K. Gottfried; *Quantum Mechanics – Volume I: Fundamentals*; Benjamin/Cummings Publishing Inc. (1966).
- [GrVo79] B. Grammaticos, A. Voros; *Semiclassical Approximations for Nuclear Hamiltonians - I. Spin-Independent Potentials*; Ann. of Phys. 123 (1979) 359.
- [HoDe99] M. J. Holland, B. DeMarco, D. S. Jin; *Evaporative Cooling of a Two-Component Degenerate Fermi Gas*; Phys. Rev. A 61 (2000) 053610.



- [HoFe97] M. Houbiers, R. Ferwerda, H. T. C. Stoof, W. I. McAlexander, et al.; *Superfluid State of Atomic  $^6\text{Li}$  in a Magnetic Trap*; Phys. Rev. A 56 (1997) 4864; and references therein.
- [HoKo64] P. Hohenberg, W. Kohn; *Inhomogeneous Electron Gas*; Phys. Rev. B 136 (1964) 864.
- [HuYa57] K. Huang, C.N. Yang; *Quantum-Mechanical Many-Body Problem with Hard-Sphere Interaction*; Phys. Rev. 105 (1957) 767.
- [Huan63] K. Huang; *Statistical Mechanics*; John Wiley & Sons, New York (1963).
- [Irvi81] J.M. Irvine; *Constrained Variational Calculations for the Nuclear Many-Body Problem*; Prog. Part. Nucl. Phys. 5 (1981) 1.
- [Jast55] R. Jastrow; *Many-Body Problem with Strong Forces*; Phys. Rev. 98 (1955) 1479.
- [Joac79] C.J. Joachain; *Quantum Collision Theory*; North-Holland Physics Publishing (1979).
- [KaLe81] M.H. Kalos, M.A. Lee, P.A. Whitlock, G.V. Chester; *Modern Potentials and the Properties of Condensed  $^4\text{He}$* ; Phys. Rev. B 24 (1981) 115.
- [KeDu99] W. Ketterle, D.S. Durfee, D.M. Stamper-Kurn; *Making, Probing and Understanding Bose-Einstein Condensates*; in *Proceedings of the Enrico Fermi summer school on Bose-Einstein condensation in Varenna, Italy*. (1998) e-print: cond-mat/9904034.
- [KrCh95] E. Krotscheck, S.A. Chin; *Theoretical Description of Helium Clusters*; Few-Body Systems Suppl. 8 (1995) 213.
- [KrTa76] E. Krotscheck, K. Takahashi; *The Equation of State of a Model Fermi Liquid*; Phys. Lett. 61B (1976) 393.
- [MaTj69] R.A. Malfliet, J.A. Tjon; *Solution of the Faddeev Equations for the Triton Problem using Local Two-Body Interactions*; Nucl. Phys. A127 (1969) 161.
- [MaYo98] M. Marinescu, L. You; *Controlling Atom-Atom Interaction at Ultralow Temperatures by dc Electric Field*; Phys. Rev. Lett. 81 (1998) 4596.
- [Mach89] R. Machleidt; *The Meson Theory of Nuclear Forces and Nuclear Structure*; Adv. Nucl. Phys. 19 (1989) 189.
- [MeFe00] M.-O. Mewes, G. Ferrari, F. Schreck, A. Sinatra, et al.; *Simultaneous Magento-Optical Trapping of Two Lithium Isotopes*; Phys. Rev. A 61 (2000) 011403.
- [Neff98] T. Neff; *Fermionische Modekularodynamik mit Konfigurationsmischung und realistischen Wechselwirkungen*; Diplomarbeit; Technische Universität Darmstadt (1998).
- [OwBi76] J.C. Owen, R.F. Bishop, J.M. Irvine; *Constrained Variation in Jastrow Method at High Density*; Ann. of Phys. 102 (1976) 170.

- [PaPi86] V.R. Pandharipande, S.C. Pieper, R.B. Wiringa; *Variational Monte Carlo Calculations of Ground States of Liquid  $^4\text{He}$  and  $^3\text{He}$  Drops*; Phys. Rev. B 34 (1986) 4571.
- [PaWi75] V.R. Pandharipande, R.B. Wiringa, B.D. Day; *Do Lowest-Order Approximations Adequately Describe Nuclear Matter?*; Phys. Lett. 57B (1975) 205.
- [PrTe92] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery; *Numerical Recipes in C/Fortran*; Cambridge University Press; 2nd edition (1992).
- [Reid68] R.V. Reid; *Local Phenomenological Nucleon-Nucleon Potentials*; Ann. of Phys. 50 (1968) 411.
- [RiKi68] M. Ristig, S. Kistler; *The Method of Unitary Transformations in the Theory of Nuclear Matter*; Z. Physik 215 (1968) 419.
- [RiLo71] M.L. Ristig, W.J. Ter Louw, J.W. Clark; *Tensor Correlations in Nuclear Matter*; Phys. Rev. C 3 (1971) 1504.
- [RiLo72] M.L. Ristig, W.J. Ter Louw, J.W. Clark; *Tensor Correlations in Nuclear Matter: Three-Body Effects*; Phys. Rev. C 5 (1972) 695.
- [RiSc80] P. Ring, P. Schuck; *The Nuclear Many-Body Problem*; Springer Verlag, New York (1980).
- [Rist67] M. Ristig; *Zur Bestimmung regulärer äquivalenter Nukleon-Nukleon-Potentiale und induzierter Mehrkörperkräfte in Vielteilchensystemen*; Z. Physik 199 (1967) 325.
- [Rist70] M. Ristig; *On the Three Body Contributions to the Ground State Energy of Nuclear Matter*; Z. Physik 232 (1970) 279.
- [RoFe00a] R. Roth, H. Feldmeier; *Effective Contact Interactions for Ultracold Fermi Gases*; GSI Annual Report 1999; GSI 2000-01 (2000) 109.
- [RoFe00b] R. Roth, H. Feldmeier; *Stability of Trapped Ultracold Fermi Gases Using Effective  $s$ - and  $p$ -Wave Contact-Interactions*; J. Phys. B 33 (2000) 787.
- [Roth97] R. Roth; *Die Methode der unitären Korrelatoren und ihre Anwendung auf kurzreichweitig abstoßende NN-Wechselwirkungen*; Diplomarbeit; Technische Hochschule Darmstadt (1997).
- [Saku94] J.J. Sakurai; *Modern Quantum Mechanics*; Addison-Wesley Publishing Company, Inc.; revised edition (1994).
- [ScSc65] E.W. Schmid, J. Schwager, Y.C. Tang, R.C. Herndon; *Binding Energies of Polyatomic  $^4\text{He}$ -Molecules*; Physica 31 (1965) 1143.
- [Sche99] U. Scherz; *Quantenmechanik*; B.G. Teubner Verlag, Stuttgart, Leipzig (1999) .
- [Schn96] J. Schnack; *Kurzreichweitige Korrelationen in der Fermionischen Molekulardynamik*; Dissertation; Technische Hochschule Darmstadt (1996).

- [StBi96] H. T. C. Stoof, M. Bijlsma, M. Houbiers; *Theory of Interacting Quantum Gases*; NIST J. Res. 101 (1997) 4864.
- [StHo98] H. T. C. Stoof, M. Houbiers; *Condensed matter physics with trapped atomic Fermi gases*; in M. Inguscio, S. Stringari, C. E. Wieman, editors, *Proceedings of the International School of Physics - Enrico Fermi*; IOS Press (1999) 537; e-print: cond-mat/9808171.
- [UCOM98] H. Feldmeier, T. Neff, R. Roth, J. Schnack; *A Unitary Correlation Operator Method*; Nucl. Phys. A632 (1998) 61.
- [ViGi00] L. Viverit, S. Giorgini, L.P. Pitaevskii, S. Stringari; *Adiabatic Compression of a Trapped Fermi Gas*; e-print: cond-mat/0005517.
- [WiSt95] R.B. Wiringa, V.G.J. Stoks, R. Schiavilla; *An Accurate Nucleon–Nucleon Potential with Charge–Independence Breaking*; Phys. Rev. C 51 (1995) 38.
- [Zabo77] J.G. Zabolitzky; *Fermi-Hypernetted-Chain Methods and the Ground State of Fermion Matter*; Phys. Rev. A 16 (1977) 1258.

# *Lebenslauf*

## *Zur Person*

Geburtsdatum:	1. Februar 1972
Geburtsort:	Ludwigshafen am Rhein
Eltern:	Heinz Roth und Christa Roth geb. Enzenauer
Familienstand:	ledig

## *Bildungsweg*

07/1978 – 05/1982	Besuch der Liebfrauenschule Frankfurt a. M. (Grundschule)
07/1982 – 06/1991	Besuch der Helmholtzschule Frankfurt a. M. (Gymnasium)
06/1991	Abitur
09/1991 – 09/1993	Grundstudium an der Technischen Hochschule Darmstadt
09/1993	Physik Vordiplom
09/1993 – 08/1997	Hauptstudium an der Technischen Hochschule Darmstadt
11/1995 – 08/1997	Diplomarbeit bei der Gesellschaft für Schwerionenforschung mit dem Thema „ <i>Die Methode der unitären Korrelatoren und ihre Anwendung auf kurzreichweitig abstoßende Nukleon-Nukleon-Wechselwirkungen</i> “
08/1997	Physik Diplom (mit Auszeichnung bestanden)
09/1997 – 10/2000	Promotionsstudium an der Technischen Universität Darmstadt
10/1997 – 9/2000	Wissenschaftliche Hilfskraft bei der Gesellschaft für Schwerionenforschung und Anfertigung der Dissertation

## *Danksagung*

Diese Dissertation ist das Ergebnis einer dreijährigen Arbeit unter der Obhut der Theoriegruppe der Gesellschaft für Schwerionenforschung in Darmstadt. Ich möchte mich an dieser Stelle bei all jenen bedanken, die mit ihrer Kritik, ihren Ideen und ihrer Unterstützung zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

An erster Stelle möchte ich meinem Doktorvater Prof. Hans Feldmeier für die vergangenen fünf Jahre der Zusammenarbeit aufs herzlichste danken. Seine ausgezeichnete Betreuung, sein Interesse, die Bereitschaft zu tiefeschürfenden und innovativen Diskussionen und die mir überlassene Freiheit bei der Wahl der Schwerpunkte haben meine Arbeit immer wieder beflügelt und zu einem Vergnügen gemacht. Seine souveräne Art wissenschaftliche und andere Probleme aufzunehmen, zu verstehen, zu veranschaulichen und zu lösen wird mir immer ein Vorbild bleiben.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Wolfgang Nörenberg für die Aufnahme in der Theoriegruppe der Gesellschaft für Schwerionenforschung, in der ich ausgezeichnete Arbeitsbedingungen vorfand und alle erdenkliche Unterstützung für meine Vorhaben erhielt. Insbesondere danke ich ihm für die Möglichkeit an zwei Programmen des Institute for Nuclear Theory in Seattle (USA) und einer Sommerschule des Institut d'Etudes Scientifiques de Cargèse (Frankreich) teilzunehmen.

Den gegenwärtigen und ehemaligen Mitgliedern und Gästen der Theoriegruppe der GSI danke ich für die freundliche und entspannte Arbeitsatmosphäre. Ein ganz herzliches Danke geht an meine langjährigen Mitstreiter Hendrik van Hees, Thomas Neff, Jürgen Schnack und Wolfgang Weinhold, die mir immer mit Rat und Tat und einem netten Wort — auch abseits der Physik — zur Seite standen. Bei Thomas Neff und Hendrik van Hess muß ich mich für die geduldige Unterstützung bei den unvermeidlichen und nie endenden Computerproblemchen bedanken. Schließlich danke ich Jürgen Schnack, Hendrik van Hees und Thomas Neff für ihre Bemühungen beim Korrekturlesen dieser Arbeit, zugegebenermaßen ein dicker Brocken.

Dem National Institute for Nuclear Theory in Seattle (USA) danke ich für die Möglichkeit zur Teilnahme an den Programmen INT-98-2 zum Thema „Atomic Clusters“ und INT-00-3 mit dem Thema „Nuclear Structure for the 21st Century“ und die dabei gewährte finanzielle Unterstützung. Dem Institut d'Etudes Scientifiques de Cargèse und dem Institut d'Optique Théorique et Appliquée in Orsay (Frankreich) danke ich für die Möglichkeit an der Sommerschule zum Thema „Bose-Einstein Condensates and Atom Lasers“ in Cargèse teilzunehmen.

Diese Arbeit wäre ohne die finanzielle und ideelle Unterstützung meiner Eltern Heinz und Christa Roth unmöglich gewesen. Sie haben mir zu jeder Zeit nach Kräften den Rücken gestärkt. Meiner lieben Melanie danke ich für ihr Verständnis und ihre Geduld mit mir; ich hoffe ich kann die Entbehrungen der letzten Zeit wiedergutmachen.